



TITLE:

近藤格子とその拡張モデルにおける  
秩序状態と動力学(修士論文  
(2008年度))

AUTHOR(S):

星野, 晋太郎

---

CITATION:

星野, 晋太郎. 近藤格子とその拡張モデルにおける秩序状態と動力学(修士論文(2008年度)). 物性研究 2009, 92(4): 377-424

ISSUE DATE:

2009-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/169139>

RIGHT:

**修士論文** (2008 年度)

## 近藤格子とその拡張モデルにおける秩序状態と動力学

東北大学大学院理学研究科物理学専攻 星野晋太郎\*<sup>1</sup>**目次**

1	序	378
1.1	$f$ 電子系における近藤効果と秩序	378
1.2	近藤系の秩序に関する実験事実	379
1.3	本論文の目的と構成	380
2	$f$ 電子と伝導電子の相互作用モデルおよび解析手法	381
2.1	$f^1$ 電子系モデル	381
2.2	$f^2$ 電子系モデル	383
2.3	グリーン関数法	386
2.4	動的平均場理論	387
3	連続時間量子モンテカルロ法	391
3.1	一重項・三重項近藤モデルに対する定式化	391
3.2	モンテカルロシミュレーション	393
3.3	物理量の計算	397
4	不純物 $f^2$ 系に対する結果	401
4.1	一重項・三重項近藤モデルの性質	401
4.2	モンテカルロシミュレーションと結晶場効果	405
4.3	領域 (II) における結果	406
5	$f^1$ および $f^2$ 配置を持つ格子系の秩序状態	409
5.1	近藤格子モデル	409
5.2	一重項・三重項近藤格子モデル	416
6	結論	420

\*<sup>1</sup> E-mail: hoshino@cmpt.phys.tohoku.ac.jp

# 1 序

## 1.1 $f$ 電子系における近藤効果と秩序

周期表において原子番号  $^{57}\text{La}$  から  $^{71}\text{Lu}$  までの元素はランタノイドまたは希土類と呼ばれる。これらの元素は内殻に  $4f$  電子を持つことが特徴であり、この電子は局在性が強いという性質を持っている。ランタノイド化合物にはこの電子の他に、各原子の最外殻電子が放出されて結晶中を動き回る電子 (伝導電子) が存在する。このとき局在電子と伝導電子との間には混成が生じ、 $f$  軌道では局在性が強いためにクーロン相互作用が働く。このように局在電子と伝導電子が織り成す物理が  $f$  電子系であり、多彩な現象が観測されている。

代表的な例としては、1つの局在モーメントと結晶中を動き回る伝導電子の問題がある。この問題は抵抗極小の現象に端を発し、その後近藤によってその理論的な説明が与えられ、今では近藤効果と呼ばれている。またこの系の基底状態は局在スピンの伝導電子のスピン分極と強く結合したシングレットであるということが芳田によって示された。一方、希土類化合物の磁気秩序は2つの局在スピン間の相互作用によって理解されるが、この相互作用は伝導電子のスピン分極を介して有効的に働く。これは RKKY 相互作用 (Ruderman-Kittel-槽谷-芳田) として知られ、 $f$  電子系の磁気秩序を説明するモデルとなっている。近藤効果が局在モーメントを遮蔽しようとする効果に対し、RKKY 相互作用はそれとは逆に局在モーメントを安定化しようとする、お互いに拮抗する効果である。もし近藤効果が RKKY 相互作用に打ち勝てば常磁性金属相が実現すると考えられる。この金属相では伝導電子と局在電子の相互作用の効果が取り込まれ、有効質量の大きい準粒子を形成する。このような状態は重い電子系と呼ばれ、メタ磁性など興味深い物性を示す。

$f$  電子はスピンの他に軌道自由度を持つため、 $f$  電子系の物理を一層豊かなものになっている。 $f$  電子は軌道角運動量  $\ell = 3$  を持ち 14 重に縮退しているが、 $\ell$  が大きいためスピンの軌道相互作用によって  $LS$  多重項に分裂する。フントの規則により、例えば  $\text{Ce}^{3+}(f^1)$  の場合は  $^2F_{5/2}$  (6 重縮退)、 $\text{Pr}^{3+}(f^2)$  の場合は  $^3H_4$  (9 重縮退) となる。さらに  $f$  電子は周りのイオンから結晶場効果を受け、この縮退はさらに解ける。こうして物質によって基底多重項は様々に変わることになる。しかし  $\text{Ce}^{3+}$  のように  $f$  電子を奇数個持つ希土類イオンでは、磁場をかけない限り時間反転対称性に基づく縮退が必ず残ることになる (クラマース 2 重項)。この 2 重項はスピンの役割を果たし、伝導電子と相互作用することに

よって近藤効果や磁気秩序などを引き起こす。

$\text{Pr}^{3+}$  イオンが立方対称な結晶中に置かれた場合、基底多重項が非クラマース 2 重項となる物質があり、クラマース縮退を持つ  $f^1$  系とは異なる振る舞いを示す。これに関連した問題として Cox によって提案された四極子近藤効果が挙げられる。一方で、ある Pr スクテルダイトにおいては基底多重項が結晶場 1 重項・3 重項という準 4 重項を形成する。伝導電子との相互作用によって基底準 4 重項は近藤効果を引き起こすと考えられるが、実際には近藤効果が観測される物質とそうでないものがある。また、その内部自由度を利用して多極子秩序を形成するものもある。

このように  $f$  電子系はその内部自由度を利用して様々な現象を発露し、活発に研究される分野のひとつになっている。 $f$  電子系の解説書としては文献 [1, 2, 3] が詳しい。

## 1.2 近藤系の秩序に関する実験事実

### 1.2.1 磁気秩序を示す Ce 化合物: $\text{CeAl}_2$

$\text{CeAl}_2$  は Laves 型立方晶という結晶構造をもつ [2]。フントの規則により 6 重に縮退していた基底多重項は立方対称な結晶場によって  $\Gamma_7$  (2 重縮退),  $\Gamma_8$  (4 重縮退) に分裂する。この 2 つの状態は 100K 程度の差があり、 $\Gamma_7$  のほうがエネルギーが低い。ゆえに十分低温では  $\Gamma_7$  に起因する物性が発現することが期待される。また、この物質は  $T_N = 3.8\text{K}$  で磁気秩序を示すことが知られている。その磁氣的構造は中性子回折によって調べられており、スピン密度波 (SDW) を形成する [4]。

$\text{CeAl}_2$  の秩序相での比熱を見る [5]。  $H = 0$  に注目すると、 $T = T_N$  で 2 次転移による比熱のとびが観測され、低温では  $C = \gamma T$  という振る舞いをする。 $\text{CeAl}_2$  の比熱係数  $\gamma$  はこの結果より  $135\text{mJ/K}^2 \cdot \text{mol}$  と見積もられる。これと参照系物質  $\text{LaAl}_2$  での値を比較すると  $\gamma_{\text{CeAl}_2}/\gamma_{\text{LaAl}_2} = 12.3$  であり、この大きな比熱係数から近藤効果による多体効果が秩序相内でも残っていると考えられる。この傾向は有効質量にも現れ、ドハース-ファンアルフエン効果によって決定されたサイクロトロン有効質量も  $\text{CeAl}_2$  の方が  $\text{LaAl}_2$  に比べて約 10 倍大きい [6]。他にも、エネルギーギャップを示唆する実験事実も存在している [7, 8]。

以上は  $\text{CeAl}_2$  について述べたが、他に秩序を示す Ce 化合物としては代表的なものとして  $\text{CeIn}_3$ ,  $\text{CeB}_6$  が挙げられる。特に  $\text{CeB}_6$  は基底状態が  $\Gamma_8$  四重項であり、この自由度を利用して反強的な四極子秩序が実現する。秩序化はエントロピーの放出と関係があり、この秩序化と同時に四重に縮退していた基底状態が 2 つのクラマース二重項に分裂することが知られている [9]。

### 1.2.2 Pr スクッテルダイト: $\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$

$\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$  は充填スクッテルダイト構造を持つ [10]。この物質中では  $\text{Pr}^{3+}$  イオンは点群  $T_h$  の対称性を持つ結晶場の下に置かれている。この結晶場準位は基底状態が一重項、第一励起状態が三重項の準四重項であると考えられている。 $\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$  の相図を見ると、 $T_Q \sim 6.5\text{K}$  で非磁性秩序を示す。

$\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$  は Pr 化合物初の近藤系物質として注目を浴びた。電気抵抗 [10] を調べると、実際に常磁性領域で  $-\log T$  的な抵抗が増加する振る舞いが確認できる。外部磁場を加えて秩序を壊すとフェルミ液体の  $T^2$  の振る舞いを示す。この係数  $A$  は大きな値を示し、重い電子状態を表している。

$\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$  における中性子散乱スペクトル [11] を見ると、転移温度  $T_Q \sim 6.5\text{K}$  よりも高温側ではブロードな準弾性ピークが観測されている。この振る舞いは重い電子系の特徴として説明することができる。この実験事実は常磁性相での遍歴的な振る舞いが秩序化とともに局在的なものへと変化したと解釈することもできる。

また、La で Pr を希釈した  $\text{Pr}_x\text{La}_{1-x}\text{Fe}_4\text{P}_{12}$  の比熱 [12] を見ると、 $x = 1$  では転移温度で比熱にとびが現れるが、 $x = 0.90$  では  $4\text{K}$  に小さいブロードなピークがあり、 $x = 0.85$  では消える。これは  $x = 1$  での秩序状態は La 置換に対して敏感で、希釈効果によって秩序はすぐに壊れてしまうことを意味している。 $\text{Pr}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_4\text{P}_{12}$  における相図 [13] は、希釈とともに非磁性秩序が壊れ強磁性相が生じることを示している。

同様の Pr スクッテルダイトである  $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$  も結晶場一重項が基底状態の準四重項を持つと考えられているが、この物質では近藤効果は観測されず低温で超伝導転移を示す [10]。 $\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$  が同様の結晶場スキームであるにもかかわらず近藤効果を示したことを考えると、この差異は結晶場効果と近藤効果の競合によってもたらされたものと考えられる。

## 1.3 本論文の目的と構成

本研究では Ce, Pr 化合物のように  $f^1$  および  $f^2$  電子配置をもつ系を考える。実際の物質では  $f$  電子が各格子点に並んだ周期系であるが、まず伝導電子の海に 1 つ局在電子を入れた不純物モデルを抑えておくことは重要である。 $f^1$  不純物系の物理は近藤モデルとしてすでによく知られているが、 $f^2$  系に関してはそうではない。そこで、 $f^2$  不純物系として結晶場準四重項と伝導電子の相互作用モデル (一重項・三重項近藤モデル) を解析する。その中でも、 $\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$  および  $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$  との関連から特に結晶場効果と近藤効果の競合

を議論する。

一方、 $f^1$  および  $f^2$  格子においては局所的な近藤効果や結晶場効果と、秩序化しようとする効果 (RKKY 相互作用) の競合が振る舞いを決定する。本研究では伝導電子のハーフフィリングおよびその近傍に話を限り、この競合を念頭において秩序状態について議論する。実在する物質の秩序は一般に複雑な構造を持つため実験との比較はできないが、基本的モデルの性質を明らかにすることは意義深い。格子系を扱う理論的手法としては動的平均場理論を用い、これは無限次元で厳密な理論である。

本論文は次のように構成されている。まず第 2 章で対象とする系の理論モデルを導出し、その解析手法について述べる。第 3 章では不純物問題を解くための連続時間量子モンテカルロ法の定式化を行う。第 4 章では  $f^2$  不純物系について結晶場効果と近藤効果の競合を中心に議論する。第 5 章では  $f^1$  格子 (近藤格子) の秩序状態とその拡張モデルである一重項・三重項近藤格子における秩序について議論し、第 6 章でこれらの結果をまとめる。

## 2 $f$ 電子と伝導電子の相互作用モデルおよび解析手法

### 2.1 $f^1$ 電子系モデル

#### 2.1.1 近藤モデル

伝導電子と局在スピンの相互作用モデルは近藤モデルと呼ばれ、次で与えられる：

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + J \mathbf{S} \cdot \mathbf{s}_c \quad (2.1)$$

この中には不純物を持つ金属の物理に関するエッセンスが入っている。このモデルはもともと金属中の鉄族不純物の問題に関連して sd モデルとして知られており、文献 [14] に詳しい解説がある。

近藤モデルは伝導電子ガスの中に 1 つだけ局在スピンを置くというモデルで、 $f$  電子が希薄な場合には良いと思われる。しかし、 $f$  電子が高濃度の場合には不純物モデルでは不適當である。この状況を反映するために、 $f$  電子を格子に並べた次のようなモデルを考えることができる：

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_{ci} \quad (2.2)$$

これは近藤格子モデル (Kondo lattice model, KLM) と呼ばれ、重い電子系を記述するモデルとして知られている。

### 2.1.2 スケーリング理論

近藤モデル (2.1) に含まれる物理を考えると、アンダーソンによる繰り込み群の方法を用いるのがよい。以下これを具体的に実行する [1]。まず伝導電子のスピンあたりの状態密度として対称なものを選ぶ ( $\varepsilon_F = 0$ ) :

$$\rho(\varepsilon) = \rho(-\varepsilon) \quad (2.3)$$

スケーリングの精神は高エネルギーの寄与を低エネルギー側に繰り込み、低エネルギー領域での有効相互作用を求めることにある。今バンドの幅が  $2W$  のとき、伝導電子の中間状態としてこのバンドの端  $[W + \delta W, W]$  と  $[-W, -W - \delta W]$  を考え ( $\delta W < 0$ )、この条件の下で有効相互作用を 2 次摂動によって導く。不純物による伝導電子スピンの散乱には直接散乱と交換散乱の 2 つがあり、交換過程ではフェルミオンの交換によるファクター  $-1$  が付く。以上を考慮し、さらに中間状態に関して和をとってしまうと有効相互作用は

$$J^2 \frac{\rho(W)\delta W}{W} \sum_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta (s_c^\alpha s_c^\beta - s_c^\beta s_c^\alpha) \quad (2.4)$$

となる ( $\alpha, \beta = x, y, z$ )。ファクターの分母  $W$  は中間状態のエネルギー、分子  $\rho(W)\delta W$  は中間状態での波数の和から来ている。また、括弧第 1 項、第 2 項はそれぞれ直接過程、交換過程を表す。スピンの交換関係を使ってさらにこれを簡単化すると、ハミルトニアン  
の形は元の相互作用と同じで、その相互作用の強さが

$$\delta J = -J^2 \frac{\rho(W)}{W} \delta W \quad (2.5)$$

だけ変化している。つまり、高エネルギー側を繰り込んだことによって有効的な相互作用の大きさが変化したわけである。これはスケーリング方程式と呼ばれ、この方程式に従って繰り込みを続けていくことは温度を下げることに対応する。 $J > 0$  のとき、方程式を解くと有効的な相互作用の強さは正の無限大に発散することがわかる。具体的にスケーリング方程式を解くために次のような長方形の状態密度を採用する :

$$\rho(\varepsilon) = \rho_c \theta(D - |\varepsilon|) \quad (2.6)$$

$D$  はもとのバンド幅を表しており、 $\rho_c = 1/2D$  である。このときの有効的な相互作用  $J$  が発散する特徴的なエネルギーは

$$T_K = D e^{-1/J_0 \rho_c} \quad (2.7)$$

で与えられ、近藤温度と呼ばれる。 $J_0 = J(W = \infty)$  は繰り込みを行う前の相互作用の強さである。

さて、この温度で何が起きているかを考えるためにハミルトニアンを考え直してみる。もともとハミルトニアンには伝導電子の運動エネルギーの項と相互作用が含まれていたが、低エネルギー領域では相互作用が強結合にスケールされて運動エネルギーの項は無視できるだろう。このときのハミルトニアンは

$$\mathcal{H} \simeq JS \cdot s_c \quad (2.8)$$

と書ける。このハミルトニアンの固有状態はシングレット、トリプレット基底であり、 $J > 0$  であるから基底状態では局在スピンと伝導電子がシングレットを組んでいることになる。こうした低エネルギー領域でのシングレット形成は近藤効果と呼ばれており、近藤温度  $T_K$  はこのようなシングレット形成が始まる目安の温度を与えている。以上のスケールリング理論は  $J$  摂動展開に基づいているため、本来は  $J$  の大きいところは議論できないが、 $T_K$  以下で局在電子と伝導電子がシングレットを組むというのは正しい描像になっている。実際には伝導電子は動き回っているので完全に局所的なシングレットではなく、広がりを持った伝導電子と局在スピンから成る多体系シングレットを形成する (Kondo cloud)。

近藤効果は周期的に  $f$  電子が並んだ近藤格子モデルでも生き残り、 $J$  が十分大きいとき各サイトで近藤シングレットを組むことになる。この近藤効果によってハーフフィリングのときは近藤絶縁体となり、一般のフィリングでは重い電子状態を形成する。 $J$  が小さい場合には RKKY 相互作用によって秩序化する。

一方、強磁性相互作用 ( $J < 0$ ) のときは低エネルギー領域になるにつれて有効的な相互作用の大きさは 0 に近づく。もともと  $J$  が小さいとして議論しており、かつ弱結合にスケールされるため常に正しい結果を与える。よって、強磁性近藤モデルの基底状態では局在スピンは完全にフリーになると考えられる。

## 2.2 $f^2$ 電子系モデル

$\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$  や  $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$  というスクッテルダイトの結晶場準位は一重項・三重項の準四重項であることが知られており、前者は近藤効果を示すが後者はそれが無いことがわかっている。これには結晶場 (crystalline electric field, CEF) によって分裂した準四重項が関わっており、本節ではこのことを念頭において局在状態と伝導電子の相互作用モデルを文献 [15] に従って導く。



### 2.2.1 一重項・三重項近藤モデル

ここでは対称性の考察により  $f^2$  系の有効相互作用を求める。 $\text{Pr}^{3+}$  や  $\text{U}^{3+}$  イオンは  $4f$  電子を 2 個持つが、フント結合により  $J = 4$  である。この 9 重縮退は点群  $O_h$  の下で  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_3$ (非クラマース二重項),  $\Gamma_4$ ,  $\Gamma_5$  のように縮退が解ける。スクッテルダイトは  $T_h$  対称性を持つので、 $O_h$  から対称性を落とすことによって結晶場固有状態を得る(点群  $T_h$  は  $O_h$  群の部分群をなす)。今準四重項のみを考えることにすると、点群  $T_h$  下では  $\Gamma_4$  と  $\Gamma_5$  の状態が混ざり合い固有状態は次のようになる。

$$|\Gamma_s\rangle = |\Gamma_1\rangle \quad (2.9)$$

$$|\Gamma_t m\rangle = \sqrt{w}|\Gamma_4 m\rangle + \sqrt{1-w}|\Gamma_5 m\rangle \quad (2.10)$$

結晶場三重項状態は  $m$  が同じもののだけが混じっていることに注意する。

準 4 重項の中で可能な遷移は三重項間遷移(演算子  $\mathbf{X}^t$ ) および一重項・三重項間の遷移(演算子  $\mathbf{X}^s$ ) である。これと伝導電子との結合モデルは次のようになる：

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = (I_t \mathbf{X}^t + I_s \mathbf{X}^s) \cdot \mathbf{s}_c \quad (2.11)$$

2 つの  $1/2$  スピンの合成によって一重項・三重項状態が構成されるように、今の一重項・三重項状態も 2 つの擬スピンによって表現することができる。一重項・三重項基底  $|\alpha\rangle$  から 2 つの擬スピン結合基底  $|\sigma\sigma'\rangle$  へ変換するユニタリ行列を  $M$  とすると、任意の  $|\alpha\rangle$  基底の演算子  $A$  は

$$\tilde{A} = M A M^{-1} \quad (2.12)$$

によって基底変換される。 $\mathbf{X}^t, \mathbf{X}^s$  に対してこの変換を施すと

$$\mathbf{X}^t = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2, \quad \mathbf{X}^s = \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2 \quad (2.13)$$

という関係があることがわかる。結晶場準位の項も変換すると ST 近藤モデルのハミルトニアンは次のように書ける。

$$\mathcal{H}_{\text{st}} = \Delta_{\text{CEF}} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + (J_1 \mathbf{S}_1 + J_2 \mathbf{S}_2) \cdot \mathbf{s}_c \quad (2.14)$$

結晶場分裂  $\Delta_{\text{CEF}}$  は正のとき、シングレットの方がエネルギーが低いことに対応する。擬スピン  $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$  と伝導電子スピン  $\mathbf{s}_c$  との結合がどちらも反強磁性的であるとすると、局在擬スピンは 2 つあるのに対し伝導電子の遮蔽チャンネルは 1 つしかなく、アンダースクリーニングのモデルになっている。

また、内積の形をした 2 つのスピンの結合は交換演算子によって書き直すことができる。擬スピン  $\mu$  状態を  $\sigma'$  から  $\sigma$  に移す演算子  $X_{\sigma\sigma'}^\mu$  を導入すると

$$\mathbf{S}_\mu \cdot \mathbf{s}_c = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} X_{\sigma\sigma'}^\mu c_{\sigma'}^\dagger c_\sigma - \frac{1}{4} n_c \quad (2.15)$$

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} X_{\sigma\sigma'}^1 X_{\sigma'\sigma}^2 + \text{const} \quad (2.16)$$

という関係が導かれる。ここで局在条件  $\sum_\sigma X_{\sigma\sigma}^\mu = 1$  を用いている。上式において、右辺第 1 項はスピンを交換する演算子になっていることがその形からわかる。以上のように、ST 近藤モデルの表現には  $\mathbf{X}^t, \mathbf{X}^s, \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, X_{\sigma\sigma'}^1, X_{\sigma'\sigma}^2$  というものがあつたが、実際にモデルを解く際にはこれらから使いやすいものを選べばよい。

$f^1$  系で近藤モデルを拡張して近藤格子モデルを考えたように、今のモデルも格子系に拡張することができる：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \Delta_{\text{CEF}} \sum_i \mathbf{S}_{1i} \cdot \mathbf{S}_{2i} + \sum_i (J_1 \mathbf{S}_{1i} + J_2 \mathbf{S}_{2i}) \cdot \mathbf{s}_{ci} \quad (2.17)$$

$\mathcal{H}_c$  は伝導電子の運動エネルギーである。この格子系モデルを一重項・三重項近藤格子モデルと呼ぶことにする。本論文ではハーフフィリングにおける秩序状態について調べる。

### 2.2.2 有効結晶場分裂

ST 近藤モデル (2.14) の結晶場効果は 2 つの擬スピン間交換相互作用の大きさとして表される。しかし、これらの擬スピンは伝導電子と相互作用しており、結晶場効果にはこの効果も繰り込まれることになる。この有効的な結晶場分裂を考えるために、 $\Delta_{\text{CEF}} = 0$  とおき、2 次摂動により有効的な擬スピン間の相互作用を求める (本論文では数値計算の困難の理由でこの条件を課している)。この際伝導電子については期待値をとってしまうことにすると、有効相互作用  $\tilde{\Delta}_{\text{CEF}}$  は

$$\tilde{\Delta}_{\text{CEF}} = -\frac{J_1 J_2}{N^2} \sum_{\mathbf{q}} \chi_0(\mathbf{q}) \quad (2.18)$$

で与えられる。今絶対零度について考え、伝導電子のバンドとして長方形 (2.6) を用いてさらに計算を進めると

$$\tilde{\Delta}_{\text{CEF}} = -\frac{\ln 4}{4D} J_1 J_2. \quad (2.19)$$

となる。ここでパウリの排他律により励起前後の電子のエネルギーは互いに符号が逆 ( $\varepsilon_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} < 0$ ) でなければならないことに注意する必要がある。 $J_1$  が  $J_2$  と逆の符号を

持っているとき、有効結晶場  $\tilde{\Delta}_{\text{CEF}}$  は正で結晶場シングレットが安定化される。一方、このとき伝導電子と擬スピンの反強磁性相互作用のために高次摂動によって近藤効果が引き起こされる。よって  $\Delta_{\text{CEF}} = 0$  という条件の下でも、結晶場効果と近藤効果の競合を議論することができる。

この2次摂動により、局在スピンの関してはハミルトニアンが次のように書き表されることになる：

$$\mathcal{H}^{(2)} = \tilde{\Delta}_{\text{CEF}} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (2.20)$$

以上は局在電子についてのみ考えたが、弱結合であっても伝導電子についての振る舞いは自明ではない。直感的な考察を行うと、十分低温 ( $T \ll \tilde{\Delta}_{\text{CEF}}$ ) における低エネルギー状態では結晶場励起が起こらず、伝導電子は局在状態による散乱を受けないものと予想される。

## 2.3 グリーン関数法

多体問題を扱うとき、解析手法としてグリーン関数法がよく用いられる [16]。ここでは一体の有限温度グリーン関数について簡潔に述べる。まず、温度グリーン関数を次のように定義する：

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau') = -\langle T_{\tau} c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle \quad (2.21)$$

$\sigma$  はスピンインデックス、 $T_{\tau}$  は虚時間  $\tau$  についての時間順序演算子、 $c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) = e^{\tau\mathcal{H}} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{-\tau\mathcal{H}}$  はハイゼンベルク表示である。ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  には時間依存性がなく、系は並進対称性を持っていると仮定しており、グリーン関数は波数  $\mathbf{k}$  と虚時間  $\tau - \tau'$  の関数として記述される。虚時間についてのフーリエ変換は

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(i\varepsilon_n) = \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' G_{\mathbf{k}\sigma}(\tau - \tau') e^{i\varepsilon_n(\tau - \tau')} \quad (2.22)$$

で定義される。 $\varepsilon_n = (2n + 1)\pi/\beta$  はフェルミオン松原振動数である。実際に意味のある量は実振動数 ( $\omega$ ) 表示であり、 $i\varepsilon_n \rightarrow \omega + i0^+$  と解析接続することによって得られる ( $+i0^+$  は因果律を表す)。いま相互作用がないときのグリーン関数を  $g_{\mathbf{k}\sigma}$  とすると、多体効果は自己エネルギーと呼ばれる量  $\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(i\varepsilon_n)$  を用いて表現される。これを使うと相互作用のあるときのグリーン関数は

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(i\varepsilon_n) = g_{\mathbf{k}\sigma}(i\varepsilon_n) + g_{\mathbf{k}\sigma}(i\varepsilon_n) \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(i\varepsilon_n) G_{\mathbf{k}\sigma}(i\varepsilon_n) \quad (2.23)$$

と書くことができる。この関係式はダイソン方程式と呼ばれ、グリーン関数のフーリエ成分について成り立つものである。また、このグリーン関数はレーマン表示と呼ばれる形で書き表すことができる：

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(i\varepsilon_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_{\mathbf{k}\sigma}(\omega)}{i\varepsilon_n - \omega} d\omega \quad (2.24)$$

$A_{\mathbf{k}\sigma}(\omega)$  は一粒子励起スペクトルを表し、状態密度はこれを波数について和をとったもので与えられる。

以上は波数空間で考えたが、次に実空間の原点でのグリーン関数について考える。原点でのグリーン関数は  $N$  をサイト数としてフーリエ変換より

$$G_{\sigma}(i\varepsilon_n) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(i\varepsilon_n) \quad (2.25)$$

となる。原点における相互作用の効果を  $t$ -マトリックスなる量によって表し、グリーン関数を次のように書く：

$$G_{\sigma}(i\varepsilon_n) = g_{\sigma}(i\varepsilon_n) + g_{\sigma}(i\varepsilon_n)t_{\sigma}(i\varepsilon_n)g_{\sigma}(i\varepsilon_n) \quad (2.26)$$

これは虚時間表示では

$$G_{\sigma}(\tau - \tau') = g_{\sigma}(\tau - \tau') + \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2 g_{\sigma}(\tau - \tau_1)t_{\sigma}(\tau_1 - \tau_2)g_{\sigma}(\tau_2 - \tau') \quad (2.27)$$

と書ける。こうして多体効果の問題は自己エネルギーや  $t$ -マトリックスを求めることに帰着されたことになる。

アンダーソンモデルの場合、 $t$ -マトリックスは  $f$  電子グリーン関数と同等のものである。一方その強相関極限である近藤モデルの場合、電荷の自由度を排除したためにグリーン関数を定義することができない。しかし、アンダーソンモデルの場合との比較から近藤モデルの  $t$ -マトリックスは局在電子の状態を記述する量であると考えられる。

## 2.4 動的平均場理論

動的平均場理論 (dynamical mean field theory, DMFT) は無限次元で厳密な理論であることが知られている。多体効果の空間相関は平均場レベルで取り込まれており、3次元系の重要な電子相関効果を含んでいると思われる。通常平均場理論では有効場は時間的に変動しない静的な場であったが、DMFT ではその名の通り時間的に変動することを許し、静的な場合に比べて格段に多くの情報を取り込むことができる。DMFT における解説は文献 [17] に詳説されている。

反強磁性を扱う場合、2つの非等価なサイトを考えなければならない。ここでは前節の定式化を A,B 部分格子系について一般化する。本節で  $A=B$  とすれば常磁性相での DMFT を再現する。

まず相互作用の無い場合を考える。このとき、ハミルトニアンは実空間表示で次のようになる：

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad (2.28)$$

$\langle i,j \rangle$  は最近接でのペアを表す。今2つの部分格子 A,B を仮定し、演算子を  $c_{i \in A, \sigma} = a_{i\sigma}, c_{i \in B, \sigma} = b_{i\sigma}$  のように定義する。するとハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\langle i_A, j_B \rangle \sigma} (t_{i_A j_B} a_{i_A \sigma}^\dagger b_{j_B \sigma} + \text{h.c.}) - \mu \left( \sum_{i_A \sigma} a_{i_A \sigma}^\dagger a_{i_A \sigma} + \sum_{i_B \sigma} b_{i_B \sigma}^\dagger b_{i_B \sigma} \right) \quad (2.29)$$

と書き直される。さらにそれぞれの部分格子上でフーリエ変換を行うと

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}, \sigma} \left[ \varepsilon_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} + \text{h.c.}) - \mu (a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma}) \right] \quad (2.30)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sum_{\boldsymbol{\delta}} t_{\boldsymbol{\delta}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} \quad (2.31)$$

となる。 $\boldsymbol{\delta}$  は最近接サイトへのベクトルを表す。ここで部分格子上では格子定数が大きくなるので、波数に関する和は還元されたブリルアンゾーン (reduced Brillouin zone, RBZ) の中でとっている。ベクトル演算子  $\mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma} = {}^t(a_{\mathbf{k}\sigma}, b_{\mathbf{k}\sigma})$  を導入して  $2 \times 2$  行列のグリーン関数を

$$\mathbf{g}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) = -\langle T_\tau \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle \quad (2.32)$$

で定義すれば、複素振動数表示は次で与えられる：

$$\mathbf{g}_{\mathbf{k}\sigma}(z)^{-1} = \begin{pmatrix} z + \mu & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \\ -\varepsilon_{\mathbf{k}} & z + \mu \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

さらに原点から原点へのグリーン関数は次のように書かれる：

$$\mathbf{g}_\sigma(z) = \frac{2}{N_0} \sum_{\mathbf{k} \in \text{RBZ}} \mathbf{g}_{\mathbf{k}\sigma}(z) \quad (2.34)$$

$N_0$  は全粒子数であり、和は RBZ でとっているために因子 2 が付くことを注意しておく。この形から状態密度  $\rho(\varepsilon)$  に対称なバンドを使うと非対角成分はゼロになることがわかる。

相互作用が無いときの対角成分のグリーン関数  $-\langle T_\tau a(\tau)a^\dagger \rangle, -\langle T_\tau b(\tau)b^\dagger \rangle$  が求まれば, DMFT で扱うべき有効不純物問題は相互作用がオンサイトであるので, それぞれのサイトで不純物問題を解くことによってその解を求めることができる。

次に相互作用のある系を考える。無限次元では自己エネルギーは局所的な量であり, かつその波数依存性は無視することができる。ゆえに相互作用のある格子系グリーン関数は

$$\bar{\mathbf{G}}_{k\sigma}(z)^{-1} = \mathbf{g}_{k\sigma}(z)^{-1} - \Sigma_\sigma(z) \quad (2.35)$$

$$\Sigma_\sigma(z) = \begin{pmatrix} \Sigma_{A\sigma}(z) & 0 \\ 0 & \Sigma_{B\sigma}(z) \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

と表せる。これより, 原点を  $\alpha (= A, B)$  サイトにとると, 原点から原点へのグリーン関数は次のように書ける:

$$\bar{G}_{\alpha\sigma}(z) = \zeta_{\bar{\alpha}\sigma}(z) \int d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{\zeta_{A\sigma}(z)\zeta_{B\sigma}(z) - \varepsilon^2} \quad (2.37)$$

ここで  $\zeta_{\alpha\sigma}(z) = z + \mu - \Sigma_{\alpha\sigma}(z)$  である。これは前節で定義した  $g(z)$  を用いれば

$$\bar{G}_{\alpha\sigma}(z) = \zeta_{\bar{\alpha}\sigma}(z) \frac{g(\tilde{z}_\sigma) - g(-\tilde{z}_\sigma)}{2\tilde{z}_\sigma} \quad (2.38)$$

と書くこともできる。ここで  $\tilde{z}_\sigma = \sqrt{\zeta_{A\sigma}(z)\zeta_{B\sigma}(z)}$  を定義してある。

今 A, B 部分格子があるので, 解くべき不純物問題は2つある。有効不純物サイトのグリーン関数を  $\mathbf{G}_\sigma$ , 有効媒質中のプロパゲータを  $\mathbf{G}_\sigma$  とすると

$$\mathbf{G}_\sigma(z)^{-1} = \mathbf{G}_\sigma(z)^{-1} + \Sigma_\sigma(z) \quad (2.39)$$

が成り立つ。さらに, 今の場合のセルフコンシステントの条件は

$$\bar{\mathbf{G}}_\sigma(z) = \mathbf{G}_\sigma(z) \quad (2.40)$$

であり, 前節と同様に解を求めることができる。特に状態密度  $\rho(\varepsilon)$  が対称なバンドであるとき,  $\mathbf{G}_\sigma(z)$  の非対角成分はゼロになることがわかる。具体的に解を求める方法としては, 今の場合「直列 (serial)」と「並列 (parallel)」の2つあり, 図1にそれらを模式的に示した。また A, B サイトでフィリングが等しい場合,  $(\alpha, \sigma) = (\bar{\alpha}, \bar{\sigma})$  という対称性がある。このように2つの部分格子を仮定して問題を扱えば, 常磁性, 強磁性, 反強磁性をカバーすることができる。しかし, インコメンシュレートの場合のような複雑な磁気秩序を扱うことはできない。

一方, 化学ポテンシャル  $\mu$  は A, B サイトの全粒子数を一定にするように決めると CDW も扱うことが可能になる。このとき上で述べた対称性はもはや成り立たないことに注意す

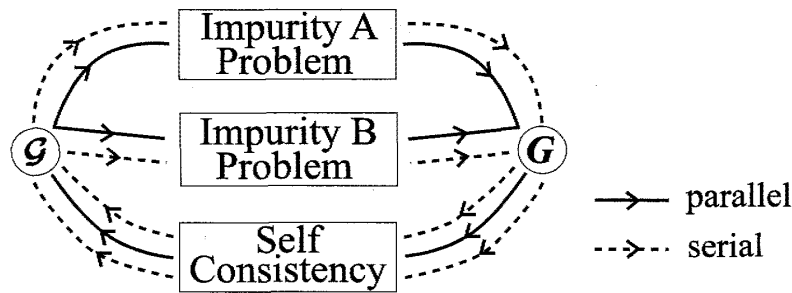


図1 部分格子における解法の模式図。直列とはまず不純物問題 A を解き，その結果を使ってキャビティグリーン関数を更新し，不純物問題 B を解くというプロセスを繰り返すものである。一方並列は不純物問題 A,B を同時に解いてしまうものである。

る必要がある。すでに生じる秩序がわかっている場合には，その対称性を使って計算の精度を上げることもできる。

最後に部分格子系の1粒子励起スペクトルおよび運動量分布関数について述べる。常磁性の場合にはグリーン関数の虚部によって与えられるが，今の場合にはグリーン関数は  $2 \times 2$  行列であり，スペクトルはそのトレースによって与えられる：

$$A_{\sigma}(\kappa, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\text{Tr } G_{\sigma}(\kappa, \omega + i\delta)] \quad (2.41)$$

動的平均場理論の枠組みの中では自己エネルギーの波数依存性が無視できるので，グリーン関数の波数依存性は  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  のみを通して入る。この事情を反映して上式では  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \kappa$  のように書いている。また，運動量分布関数はいろいろな表現が考えられるが，本論文では次のようなものを用いる。まず，グリーン関数を各振動数について対角化して

$$G_{\sigma}^{\text{diag}}(\kappa, z) = \begin{pmatrix} G_{\sigma}^{(+)}(\kappa, z) & 0 \\ 0 & G_{\sigma}^{(-)}(\kappa, z) \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

とする。対角化する際に2次方程式を解くことになるが，そのときの根号の正，負の場合をそれぞれ  $G^{(+)}$ ,  $G^{(-)}$  とする。常磁性状態のグリーン関数は松原振動数に関するフーリエ変換から運動量分布関数を求めることができるが，今それと同様の方法によって次のように求める：

$$n_{\sigma}^{\pm}(\kappa) = \frac{1}{\beta} \sum_n G_{\sigma}^{(\pm)}(\kappa, i\varepsilon_n) e^{i\varepsilon_n 0^+} \quad (2.43)$$

上の対角化したグリーン関数のトレースは対角化する前のそれと等しいため，どちらも同じスペクトルを再現する。以上は相互作用がある一般的な場合について考えたが，相互作用のない場合を考えると具体的に理解することができる。

### 3 連続時間量子モンテカルロ法

近年開発された連続時間量子モンテカルロ法 (continuous-time quantum Monte Carlo method, CT-QMC) は不純物モデルを解く強力な手法である。この手法は初め Rubstov ら [18] がクーロン相互作用の摂動展開によって定式化した。後に Werner と Millis[19] が伝導電子と局在電子の混成に関する摂動展開に拡張し、最近では CT-QMC は大槻ら [20] によって強相関モデルである Coqblin-Schrieffer モデルと近藤モデルに対して適用された。この手法の特徴は負符号問題が無く、得られた結果はモンテカルロ法による統計誤差の範囲で厳密であるということにある。

本章では近藤モデルにおける CT-QMC を ST 近藤モデルに拡張して適用する。この定式化は不純物近藤モデルにおいて、原点にある局在スピンの数を任意の数に一般化するものである。近藤モデルに対する CT-QMC は反強磁性相互作用にのみ適用されたが、ST 近藤モデルは局在擬スピンと伝導電子の相互作用は強磁性結合も出てくる。しかし CT-QMC は若干の変更によって強磁性相互作用の場合にも適用可能である。

#### 3.1 一重項・三重項近藤モデルに対する定式化

前に示したように、結晶場分裂が無いとき ( $\Delta_{\text{CEF}} = 0$ ) の ST 近藤モデルは次のように書くことができる：

$$\mathcal{H}_{\text{st}} = \mathcal{H}_c + 2(J_1 \mathbf{S}_1 + J_2 \mathbf{S}_2) \cdot \mathbf{s}_c \quad (3.1)$$

ここで相互作用定数を 2 章の値の 2 倍にしていることを注意しておく (次式の形を CT-QMC で扱いたいためである)。このハミルトニアンは交換演算子を使うと次のように書かれる：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad (3.2)$$

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_f = \left( \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{J_1 + J_2}{2} \sum_{\sigma} c_{\sigma}^\dagger c_{\sigma} \right) + \sum_{\mu\sigma} E_{\sigma}^{\mu} X_{\sigma\sigma}^{\mu} \quad (3.3)$$

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{\mu} J_{\mu} \sum_{\sigma\sigma'} X_{\sigma\sigma'}^{\mu} (c_{\sigma}^\dagger c_{\sigma'} - \alpha_{\mu}) + \sum_{\mu} J_{\mu} \alpha_{\mu} \quad (3.4)$$

$\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$  は化学ポテンシャルから測った伝導電子のエネルギーであり、 $\mu = 1$  or  $2$ ,  $\sigma = \uparrow$  or  $\downarrow$  はそれぞれ不純物、スピン成分についての添え字を表している。パラメータ  $\alpha_{\mu}$  は相互作用が反強磁性のときは 1、強磁性の場合には 0 を用いる。また、エネルギーを問題に



しない限りハミルトニアン $\mathcal{H}_0$ の定数項を無視してよい。定式化においては磁場をかけた場合にも対応できるように、不純物準位を  $E_g^\mu$  によって与えている。分配関数は虚時間  $\tau$  を用いて

$$Z = \text{Tr} \left\{ T_\tau e^{-\beta \mathcal{H}_0} \exp \left[ - \int_0^\beta d\tau \mathcal{H}_1(\tau) \right] \right\} \quad (3.5)$$

となる。 $\beta = 1/T$  は逆温度である。時間依存性は相互作用表示で表しており、 $A(\tau) = e^{\tau \mathcal{H}_0} A e^{-\tau \mathcal{H}_0}$  である。これは指数関数を展開すれば

$$Z = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_k \text{Tr} [T_\tau e^{-\beta \mathcal{H}_0} \mathcal{H}_1(\tau_1) \cdots \mathcal{H}_1(\tau_k)] \quad (3.6)$$

と書ける。相互作用がないときの伝導電子の分配関数への寄与を  $Z_c = \text{Tr}_c e^{-\beta \mathcal{H}_c}$ 、不純物の寄与を  $Z_f = \text{Tr}_f e^{-\beta \mathcal{H}_f}$  として  $Z = Z_1 Z_f Z_c$  によって  $Z_1$  を定義すると

$$Z_1 = \sum_k \frac{1}{k!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_k \sum_{\mu_1 \cdots \mu_k} \sum_{\sigma_1 \sigma'_1} \cdots \sum_{\sigma_k \sigma'_k} J_{\mu_1} \cdots J_{\mu_k} \\ \times \langle T_\tau c_{\sigma_1}(\tau_1) c_{\sigma'_1}^\dagger(\tau_1) \cdots c_{\sigma_k}(\tau_k) c_{\sigma'_k}^\dagger(\tau_k) \rangle_c \langle T_\tau X_{\sigma_1 \sigma'_1}^{\mu_1}(\tau_1) \cdots X_{\sigma_k \sigma'_k}^{\mu_k}(\tau_k) \rangle_f \quad (3.7)$$

が得られる。ここで伝導電子、不純物についての平均は次のように定義される：

$$\langle \cdots \rangle_c = \text{Tr}_c [e^{-\beta \mathcal{H}_c} \cdots] / Z_c \quad (3.8)$$

$$\langle \cdots \rangle_f = \text{Tr}_f [e^{-\beta \mathcal{H}_f} \cdots] / Z_f \quad (3.9)$$

(3.7) を見ると、 $\{\tau_1, \cdots, \tau_k\}$  をどのように入れ替えてもそれぞれは同じものであることがわかる (このような組み合わせの数は  $k!$  通りある)。ゆえに

$$\beta > \tau_k > \tau_{k-1} > \cdots > \tau_2 > \tau_1 \geq 0 \quad (3.10)$$

という順序に並び替えたものだけを考えればよい。以上により分配関数は

$$Z_1 = \int \mathcal{D}q W(q) \quad (3.11)$$

$$\int \mathcal{D}q = \sum_k \int^{\text{ordered}} d\tau_1 \cdots d\tau_k \sum_{\{\mu_k\}} \sum_{\{\sigma_k\}} \sum_{\{\sigma'_k\}} \quad (3.12)$$

$$W(q) = J_{\mu_1} \cdots J_{\mu_k} s \prod_{\sigma} \langle T_\tau c_\sigma^\dagger(\tau'_1) c_\sigma(\tau''_1) \cdots c_\sigma^\dagger(\tau'_{k_\sigma}) c_\sigma(\tau''_{k_\sigma}) \rangle_c \\ \times \prod_{\mu} \langle T_\tau X_{\sigma_1 \sigma'_1}^{\mu}(\tau_1) \cdots X_{\sigma_{k_\mu} \sigma'_{k_\mu}}^{\mu}(\tau_{k_\mu}) \rangle_f \quad (3.13)$$

$$q = (k, \{\tau_k\}, \{\mu_k\}, \{\sigma_k\}, \{\sigma'_k\}) \quad (3.14)$$

となる。ここで  $\{\alpha_k\} = \{\alpha_1, \dots, \alpha_k\}$  ( $\alpha = \tau, \mu, \sigma$ ) である。上の表式では (3.7) と記号の意味が異なるところがあるが、この記法は添え字が煩雑になるために用いているのであって、その意味は (3.7) と対応させて評価しなければならないことを注意しておく。ここでは伝導電子部分を各  $\sigma$  ごとに、不純物部分を各  $\mu$  ごとにまとめており、伝導電子の生成・消滅演算子の交換の際に出てくる符号を  $s$  とした。また、 $k_\sigma$  はスピン成分  $\sigma$  の生成・消滅演算子のペア数、 $k_\mu$  は擬スピン  $\mu$  の  $X$ -オペレータの個数であり、 $\sum_\sigma k_\sigma = \sum_\mu k_\mu = k$  を満たす。原点での相互作用を受けていない伝導電子のグリーン関数  $g_\sigma(\tau) = -\langle T_\tau c_\sigma(\tau) c_\sigma^\dagger \rangle_c$  を使って行列  $(D_\sigma^{(k_\sigma)})_{jl} = g_\sigma(\tau_j'' - \tau_l')$  を定義すると、Wick の定理により

$$\langle T_\tau c_\sigma^\dagger(\tau_1') c_\sigma(\tau_1'') \cdots c_\sigma^\dagger(\tau_{k_\sigma}') c_\sigma(\tau_{k_\sigma}'') \rangle_c = \det D_\sigma^{(k_\sigma)} \quad (3.15)$$

のように伝導電子部分を表すことができる。(3.12) の積分が実行できれば計算できるのであるが、実際には不可能なため、位相空間  $\{q\}$  を重み  $W(q)$  に従ってランダムウォークすることによってこの積分を実行する。(3.12) で与えられる摂動次数  $k$  の位相空間の体積は  $\int \mathcal{D}q = (2^3 \beta)^k / k!$  で与えられるが、因子  $1/k!$  のために  $k \rightarrow \infty$  ではこの体積は 0 に収束する。よって有限次元のサンプリングによって評価することができるが、 $\beta$  が大きくなるほどこの収束は遅くなる。

### 3.2 モンテカルロシミュレーション

重み  $W(q)$  に従ってランダムウォークする際、実際に状態の実現させる方法としてはメトロポリス法を採用する。具体的には 2 つの状態  $q_i, q_j$  を考え、それらの間の遷移確率の比  $R = p(q_i \rightarrow q_j) / p(q_j \rightarrow q_i)$  を求める。そしてその 2 つの状態を確率

$$w = \min(1, R) \quad (3.16)$$

によって実現させるというものである。またランダムウォークする際に位相空間  $\{q\}$  を全て回るというエルゴード性を満たす必要がある。

前節より、不純物の分配関数への寄与は

$$\langle T_\tau \hat{W}_f(q) \rangle_f = \langle T_\tau X_{\sigma_1 \sigma_1'}^\mu(\tau_1) \cdots X_{\sigma_{k_\mu} \sigma_{k_\mu}'}^\mu(\tau_{k_\mu}) \rangle_f \quad (3.17)$$

である。これをセグメントで表すと便利であり、図 2 にその例が描いてある。今の場合セグメントは  $\mu = 1, 2$  の 2 つあり、図 2 左図には伝導電子部分も描いてある。セグメント上のある時刻  $\tau$  でスピンが  $\sigma \rightarrow \sigma'$  と変化したら、その時刻に伝導電子は  $c_\sigma^\dagger(\tau) c_{\sigma'}(\tau)$  という演算子があることに対応する。このセグメントを様々に変化させることが位相空間

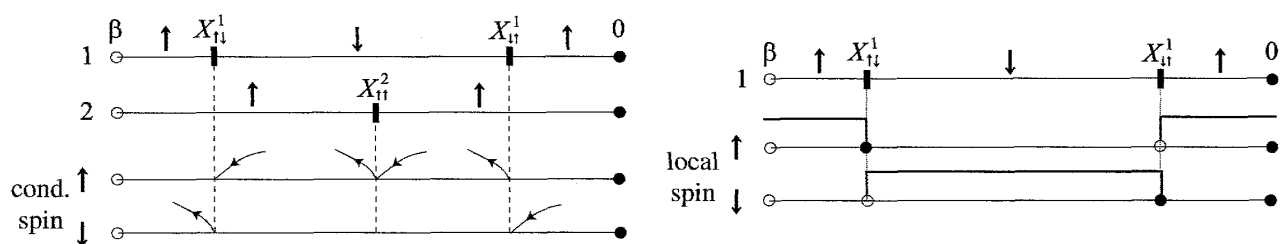


図2 ST 近藤モデルのセグメントの例 ( $k_1 = 2, k_2 = 1, k_\uparrow = 2, k_\downarrow = 1$ )。左図は伝導電子部分と一緒に描いてあり，右図は局在擬スピン 1 に注目してスピンごとに描いてある。

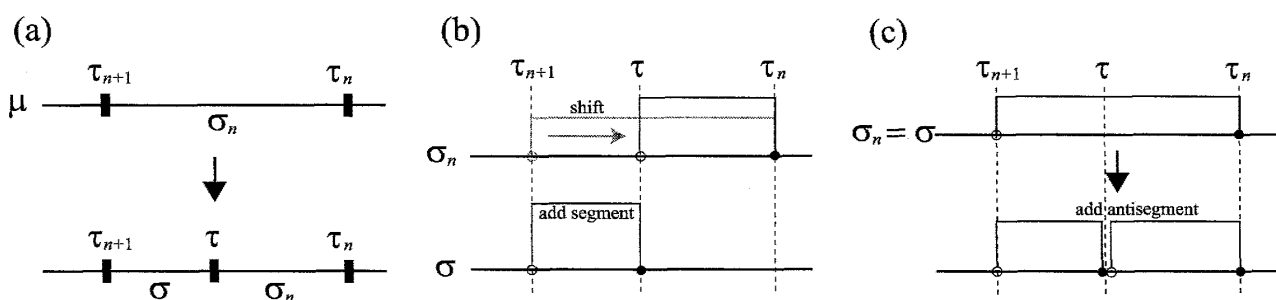


図3 セグメントの追加手続きの模式図。(a) 擬スピンへのセグメントの追加，(b)  $\sigma \neq \sigma_n$  の場合のスピンごとのセグメント操作，(c)  $\sigma = \sigma_n$  の場合。

$\{q\}$  をランダムウォークすることと対応しており，本節ではこのセグメントの更新について考える。具体的な更新を考えるときは図2右図のように，片方の擬スピンに注目すると考えやすい。

### 3.2.1 セグメントの追加と削除

セグメントを追加するとき，まず  $\mu = 1, 2$  のどちらの擬スピンに追加するかをランダムに決める。そして  $[0, \beta)$  の中からランダムに  $\tau$  を選び， $\mu$ -擬スピンに図3(a)のように  $\tau_{n+1}$  と  $\tau_n$  の間に新しく追加する。このとき，挿入されるセグメントのスピン  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  はランダムに決める。一方，削除する際にはまず  $\mu = 1, 2$  のどちらの擬スピン上のセグメントを削除するかをランダムに決め，その後セグメントの中からひとつランダムに選んで削除すればよい。

今追加される前のセグメント数を  $k_\mu$ ，重みを  $W_{k_\mu}$  とすれば，詳細釣り合いの条件より

$$R(k_\mu, k_\mu + 1) \equiv \frac{p(k_\mu \rightarrow k_\mu + 1)}{p(k_\mu + 1 \rightarrow k_\mu)} = \frac{W_{k_\mu + 1}}{W_{k_\mu}} \frac{2\beta}{k_\mu + 1} \quad (3.18)$$

が成り立つ。 $p(k \rightarrow k')$  は更新確率である。因子  $2, \beta, 1/(k_\mu + 1)$  は上で述べたセグメントの追加と削除の方法が非等価であることに関係している。図 3(b) に  $\sigma \neq \sigma_n$  におけるスピンごとのセグメントの変化が描いてあるが、挿入されたスピン  $\sigma$  セグメントは追加し、その隣のスピン  $\sigma_n$  セグメントはシフトする必要がある。このとき伝導電子部分は  $c_{\sigma_n}^\dagger(\tau_{n+1}) \rightarrow c_{\sigma_n}^\dagger(\tau) c_\sigma^\dagger(\tau_{n+1}) c_\sigma(\tau)$  という変更を受けることになる。こうして伝導電子部分が  $D_\sigma \rightarrow D_\sigma^{(+)}, D_{\sigma_n} \rightarrow \tilde{D}_{\sigma_n}$  のように変化したとすれば

$$\frac{W_{k_\mu+1}}{W_{k_\mu}} = J_\mu e^{-\ell(E_\sigma^\mu - E_{\sigma_n}^\mu)} \frac{\det D_\sigma^{(+)} \det \tilde{D}_{\sigma_n}}{\det D_\sigma \det D_{\sigma_n}} \quad (3.19)$$

が得られる。 $\ell = \tau_{n+1} - \tau_n$  は追加されるセグメントの長さである。これは  $\sigma = \sigma_n$  のときは図 3(c) のようにセグメントを分割 (アンチセグメントの追加) すればよいのでさらに簡単になる。伝導電子部分には  $c_\sigma^\dagger(\tau) c_\sigma(\tau)$  を付け加える。この操作で  $D_\sigma \rightarrow D_\sigma'^{+}$  のように変化したとすると重みの比は

$$\frac{W_{k_\mu+1}}{W_{k_\mu}} = -J_\mu \frac{\det D_\sigma'^{+}}{\det D_\sigma} \quad (3.20)$$

となる。実際には  $c_\sigma(\tau) c_\sigma^\dagger(\tau)$  を追加するのだが、因子  $-1$  によってアンチセグメントの追加を反映している。

最後に  $k_\mu = 0$  の場合について触れておく。 $W_0 = 1$  であることから、 $W_1$  の分母  $Z_f$  をあらわに考えなければならないことに注意が必要である。一般には  $k_\sigma \neq 0$  であり、このときはアンチセグメントの追加でよいので

$$\frac{W_1}{W_0} = -J_\mu \rho_\sigma^\mu \frac{\det D_\sigma'^{+}}{\det D_\sigma} \quad (3.21)$$

が得られる。ここで  $\rho_\sigma^\mu = e^{-\beta E_\sigma^\mu} / \sum_{\sigma'} e^{-\beta E_{\sigma'}^\mu}$  である。とくに  $k_\sigma = 0$  のときは行列  $D_\sigma'^{+}$  は同時刻グリーン関数となる。

### 3.2.2 セグメントのシフト

ここで考える状態の更新は、セグメントの個数は変えないでその場所をシフトするというものである。まず  $\mu$  とシフトさせる時間  $\tau_n$  をランダムに決め、新しい時間  $\tau'_n$  は  $(\tau_{n-1}, \tau_{n+1})$  の範囲からランダムに選ぶ。これは図で表すと図 4(a) に示したようにシフトさせており、スピンごとのセグメントは図 4(b) のような変化を受ける。また、伝導電子部分は  $c_{\sigma_n}^\dagger(\tau_n) c_{\sigma_{n-1}}(\tau_n) \rightarrow c_{\sigma_n}^\dagger(\tau'_n) c_{\sigma_{n-1}}(\tau'_n)$  と変化する ( $\sigma_n$  は行、 $\sigma_{n-1}$  は列がそれ

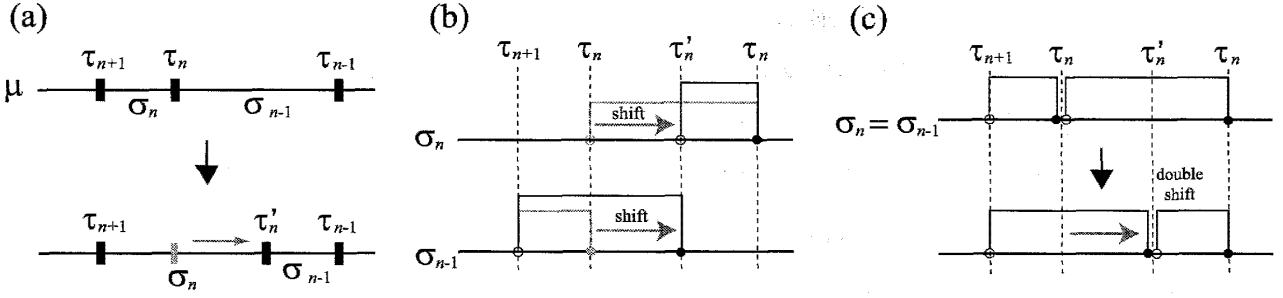


図4 セグメントシフトの模式図。(a) 擬スピンのセグメントシフト, (b)  $\sigma_n \neq \sigma_{n-1}$  の場合のspinごとのセグメント操作, (c)  $\sigma_n = \sigma_{n-1}$  の場合。

ぞれシフトされる)。このとき伝導電子部分が  $D_{\sigma_n} \rightarrow \tilde{D}_{\sigma_n}, D_{\sigma_{n-1}} \rightarrow \tilde{D}_{\sigma_{n-1}}$  のように変化したとすると、確率比は

$$R(\tau_n, \tau'_n) \equiv \frac{p(\tau_n \rightarrow \tau'_n)}{p(\tau'_n \rightarrow \tau_n)} = e^{\ell(E_{\sigma_n} - E_{\sigma_{n-1}})} \frac{\det \tilde{D}_{\sigma_n} \det \tilde{D}_{\sigma_{n-1}}}{\det D_{\sigma_n} \det D_{\sigma_{n-1}}} \quad (3.22)$$

となる ( $\ell = \tau'_n - \tau_n$ )。また、 $\sigma_n = \sigma_{n-1}$  のときは図 4(c) のように、同じスピンのセグメントに対して 2 つのシフト (行と列のシフト) を行う。このとき  $D_{\sigma_n} \rightarrow \tilde{\tilde{D}}_{\sigma_n}$  と変化したとして

$$R(\tau_n, \tau'_n) = \frac{\det \tilde{\tilde{D}}_{\sigma_n}}{\det D_{\sigma_n}} \quad (3.23)$$

となる。セグメントの追加においては図 3(c) ではアンチセグメントを追加するだけでよかったが、シフト操作は図 4(c) の場合において計算量が追加の場合に比べて多くなることを注意しておく。このシフト操作によって、摂動次数を固定したサンプリングや  $\tau$ -積分を効率よく計算することができる。

### 3.2.3 スピントリップ

以上は一部の更新であったが、ここでは状態  $q$  全体を変えるような操作を考える。今  $\uparrow, \downarrow$  を入れ替えて伝導電子部分が  $D_{\sigma} \rightarrow \bar{D}_{\sigma}$  となったとする。スピントリップ前の擬スピン  $\mu$  の  $\sigma$  セグメントの長さを  $\ell_{\sigma}^{\mu}$  とすると更新確率の比は次のようになる：

$$R(\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow) = \frac{\det \bar{D}_{\uparrow} \det \bar{D}_{\downarrow}}{\det D_{\uparrow} \det D_{\downarrow}} \prod_{\mu} e^{(E_{\uparrow}^{\mu} - E_{\downarrow}^{\mu})(\ell_{\uparrow}^{\mu} - \ell_{\downarrow}^{\mu})} \quad (3.24)$$

もし  $\uparrow, \downarrow$  が等価であれば確率比は 1 となる。この操作はセグメントの追加、削除、シフトだけでは到達し得ない位相空間領域があるときに有効である。後で具体的に見るように、

スピン揺らぎがある場合にはスピントリップが威力を発揮する。

### 3.3 物理量の計算

ある物理量  $\hat{A}$  の期待値は

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z_1} \int \mathcal{D}q \langle T_\tau \hat{W}(q) \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z_1} \int \mathcal{D}q W(q) A(q) \equiv \langle A(q) \rangle_{\text{MC}} \quad (3.25)$$

$$W(q) = \langle \langle T_\tau \hat{W}(q) \rangle \rangle \quad (3.26)$$

$$A(q) = \frac{\langle \langle T_\tau \hat{W}(q) \hat{A} \rangle \rangle}{\langle \langle T_\tau \hat{W}(q) \rangle \rangle} \quad (3.27)$$

で与えられる。ここで  $\hat{W}(q)$  は (3.13) の期待値がとられる前の演算子であり、2重括弧  $\langle \langle \dots \rangle \rangle$  は2つの期待値  $\langle \dots \rangle_c, \langle \dots \rangle_f$  を表している。実際の計算ではこの期待値を有限の  $N_{\text{MC}}$  回のサンプリングによって

$$\langle A(q) \rangle_{\text{MC}} \simeq \frac{1}{N_{\text{MC}}} \sum_{q_{\text{MC}}} A(q_{\text{MC}}) \quad (3.28)$$

のように近似する ( $N_{\text{MC}} \rightarrow \infty$  で厳密に求まる)。しかし、状態  $q$  の中には  $W(q) = 0$  であるが物理量に寄与するものが存在する。横帯磁率などがその例であり、このとき  $A(q) = \infty$  である。このような量は重み  $W(q)$  の位相空間積分では計算できないが、例えば横帯磁率は他の方法で求めることができる。

#### 3.3.1 $t$ -マトリックス

伝導電子グリーン関数は次のように計算される：

$$G_\sigma(\tau - \tau') = \frac{1}{Z_1} \int \mathcal{D}q \langle T_\tau \hat{W}(q) c_\sigma^\dagger(\tau') c_\sigma(\tau) \rangle = \left\langle \frac{\det D_\sigma^{(k_\sigma+1)}}{\det D_\sigma^{(k_\sigma)}} \right\rangle_{\text{MC}} \quad (3.29)$$

$D_\sigma^{(k_\sigma+1)}$  は  $D_\sigma^{(k_\sigma)}$  の  $k_\sigma + 1$  行と  $k_\sigma + 1$  列に  $c_\sigma^\dagger(\tau') c_\sigma(\tau)$  に対応する行と列を加えたものである。これはグリーン関数の逆行列を用いると

$$G_\sigma(\tau - \tau') = g_\sigma(\tau - \tau') - \left\langle \sum_{i,j=1}^{k_\sigma} g_\sigma(\tau - \tau_j) [M_\sigma^{(k_\sigma)}]_{ji} g_\sigma(\tau_i - \tau') \right\rangle_{\text{MC}} \quad (3.30)$$

となることがわかる ( $M = D^{-1}$ )。これに任意の周期 (反周期) 関数  $F_{+(-)}(\tau)$  についての関係式

$$F_\pm(\tau) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 F(\tau_1 - \tau_2) \delta_\pm(\tau, \tau_1 - \tau_2) \quad (3.31)$$

を使って積分を挿入し、(2.27) の  $t$ -マトリックスの定義式と見比べると

$$t_\sigma(\tau) = -\frac{1}{\beta} \left\langle \sum_{i,j=1}^{k_\sigma} [M_\sigma^{(k_\sigma)}]_{ji} \delta_-(\tau, \tau_j - \tau_i) \right\rangle_{\text{MC}} \quad (3.32)$$

という関係が得られる。ここで  $\delta_{+(-)}(\tau, \tau')$  は  $[0, \beta)$  で周期性 (反周期性) が課されたデルタ関数である。また、第1ボルン近似より松原振動数表示の  $t$ -マトリックスには定数項が含まれることがわかるが、これは虚時間表示では  $\tau = 0$  にデルタ関数として現れることを注意しておく。実際のシミュレーションでは (3.32) のデルタ関数は長方形に置き換えるが、この近似は松原形式の低振動数領域には影響しない。

シミュレーション中は、相互作用がないときの伝導電子グリーン関数  $g$  は (3.3) のポテンシャル散乱項を含んでおり、この効果は計算の最後で取り除かれるべきである。(3.3) におけるポテンシャル散乱項を  $v \sum_\sigma c_\sigma^\dagger c_\sigma$  と書き、これを除いたグリーン関数を  $g_0$  とすると

$$g(z) = g_0(z) + g_0(z)vg(z) \quad (3.33)$$

という関係がある。 $z$  は複素振動数である。 $g, g_0$  を用いたサンプリングによって得られる  $t$ -マトリックスをそれぞれ  $t, t_0$  とすれば、フルのグリーン関数  $G$  を

$$G(z) = g(z) + g(z)t(z)g(z) = g_0(z) + g_0(z)t_0(z)g_0(z) \quad (3.34)$$

のように2通りの方法で表すことで  $t_0$  を求めることができて次のようになる：

$$t_0(z) = \frac{v}{1 - vg(z)} + \frac{t(z)}{[1 - vg(z)]^2} \quad (3.35)$$

伝導電子のバンドが対称のとき、ST 近藤モデルは粒子-ホール対称性があるので  $\text{Re} t_0(z) = 0$  が成り立つ。

### 3.3.2 局所的相関関数

モンテカルロシミュレーションにおいて、局在電子の2粒子間相関関数は次の量から計算される：

$$\begin{aligned} \langle T_\tau X_{\sigma\sigma}^{\mu\text{H}}(\tau) X_{\sigma'\sigma'}^\nu \rangle &= \frac{1}{Z_1} \int \mathcal{D}q \langle \langle T_\tau \hat{W}(q) X_{\sigma\sigma}^\mu(\tau) X_{\sigma'\sigma'}^\nu \rangle \rangle \\ &= \left\langle \frac{\langle T_\tau \hat{W}_f(q) X_{\sigma\sigma}^\mu(\tau) X_{\sigma'\sigma'}^\nu \rangle_f}{\langle T_\tau \hat{W}_f(q) \rangle_f} \right\rangle_{\text{MC}} \end{aligned} \quad (3.36)$$

$H$  はハイゼンベルク表示を表しており、 $\hat{W}_f(q)$  は (3.17) で定義されている。相関関数の時間依存性は 2 体間の時間差のみに依存する。よってこれをさらに

$$\left\langle \frac{1}{\beta} \int d\tau' \frac{\langle T_\tau \hat{W}_f(q) X_{\sigma\sigma}^\mu(\tau + \tau') X_{\sigma'\sigma'}^\nu(\tau') \rangle_f}{\langle T_\tau \hat{W}_f(q) \rangle_f} \right\rangle_{MC} \quad (3.37)$$

のように書き直すことができ、 $\tau'$ -積分の中身について考える。表式から  $\mu$ -擬スピン上のある時刻  $\tau'$  ではスピン  $\sigma'$  の状態でなければ値は残らない。かつ、 $\nu$ -擬スピン上の時刻  $\tau + \tau'$  においてスピン  $\sigma$  でなければいけない。 $\tau'$  について積分するので、これらが成り立つセグメントの長さを  $L_{\sigma\sigma'}^{\mu\nu}(\tau)$  とすれば

$$\langle T_\tau X_{\sigma\sigma}^{\mu H}(\tau) X_{\sigma'\sigma'}^\nu(\tau') \rangle = \frac{\langle L_{\sigma\sigma'}^{\mu\nu}(\tau) \rangle_{MC}}{\beta} \quad (3.38)$$

が得られる。別の言い方をすれば、 $\mu$ -擬スピンと「 $\tau$  だけずらした  $\nu$ -擬スピン」において、 $\mu$ -擬スピン上で  $\sigma$  であり、 $\nu$ -擬スピン上で  $\sigma'$  であるようなセグメントの長さの合計が  $L_{\sigma\sigma'}^{\mu\nu}(\tau)$  である。

一方上で定義した相関関数とは異なり、横帯磁率は先程の方法では計算することができない。これはモンテカルロシミュレーションで実現されない状態  $q$  が横帯磁率に寄与するためである ( $W(q) = 0$ )。よって次に一般の相関関数に対する計算法を考える。相関関数として次のような一般的な形を考える：

$$\langle T_\tau X_{\sigma_1\sigma_2}^{\mu H}(\tau) X_{\sigma_3\sigma_4}^{\nu H}(\tau') \rangle = \frac{1}{Z_1} \int \mathcal{D}q \langle \langle T_\tau \hat{W}(q) X_{\sigma_1\sigma_2}^\mu(\tau) X_{\sigma_3\sigma_4}^\nu(\tau') \rangle \rangle \quad (3.39)$$

今状態  $q$  に伝導電子の演算子  $c_{\sigma_2}^\dagger(\tau_1) c_{\sigma_1}(\tau_1) c_{\sigma_4}^\dagger(\tau_2) c_{\sigma_3}(\tau_2)$  を加えて  $q'$  を作る。 $\tau_1, \tau_2$  はそれぞれ  $\mu, \nu$ -擬スピンに属しているものとする。すると上式は

$$\frac{1}{Z_1} \int \mathcal{D}q' \left[ \frac{1}{\beta J_\mu J_\nu} \frac{\det D^{(k)}}{\det D^{(k+2)}} \delta_+(\tau - \tau', \tau_1 - \tau_2) \right] W(q') \quad (3.40)$$

のように変形することができる。 $D^{(k)}$  はスピンをひとつにまとめた伝導電子部分の行列であり、 $\delta_+(\tau, \tau')$  は  $[0, \beta)$  で周期的なデルタ関数である。ここで (3.31) を使って積分を挿入している。行列式の比は

$$\frac{\det D^{(k)}}{\det D^{(k+2)}} = (M_{ji}^{\sigma_1} \delta_{\sigma_1\sigma_2})(M_{ml}^{\sigma_3} \delta_{\sigma_3\sigma_4}) - (M_{jl}^{\sigma_2} \delta_{\sigma_2\sigma_3})(M_{mi}^{\sigma_1} \delta_{\sigma_1\sigma_4}) \quad (3.41)$$

$$\text{with } \tau_j = \tau_i = \tau_1, \tau_m = \tau_l = \tau_2 \quad (3.42)$$

となる。クロネッカーのデルタはグリーン関数がスピンに対して対角的であることに起因しており、逆行列は  $M^\sigma = M_\sigma^{(k_\sigma)}$  のように略記してある。今モンテカルロシミュレー



シオンにおいて状態  $q'$  が実現していると考えと、必ず  $\tau_1 \neq \tau_2$  が満たされる。各時刻の寄与はデルタ関数があるので  $\tau_1, \tau_2$  に関して和をとることでき、結局次の公式を得る：

$$\langle T_\tau X_{\sigma_1\sigma_2}^{\mu H}(\tau) X_{\sigma_3\sigma_4}^\nu \rangle = \frac{1}{\beta J_\mu J_\nu} \left\langle \sum_{\tau_i=\tau_j}^{\epsilon_\mu} \sum_{\tau_l=\tau_m}^{\epsilon_\nu} \left[ M_{ji}^{\sigma_1} M_{ml}^{\sigma_3} \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta_{\sigma_3\sigma_4} - M_{jl}^{\sigma_2} M_{mi}^{\sigma_1} \delta_{\sigma_2\sigma_3} \delta_{\sigma_1\sigma_4} \right] \delta_+(\tau, \tau_i - \tau_l) \right\rangle_{MC} \quad (3.43)$$

前の方法に比べてこの公式で得られる結果は精度が悪い。これは今の場合 1 回のサンプルで得る全情報量が決まっているのに対し、セグメントを使う方法では情報量が  $\tau$  ごとに決まっているためである。しかし今の方法は前に比べて適用範囲が広い。実際にこの公式が必要となるのは横帯磁率の計算であるが、その公式を具体的に書くと

$$\langle T_\tau X_{\sigma\bar{\sigma}}^{\mu H}(\tau) X_{\bar{\sigma}\sigma}^\nu \rangle = -\frac{1}{\beta J_\mu J_\nu} \left\langle \sum_{\tau_i=\tau_j}^{\epsilon_\mu} \sum_{\tau_l=\tau_m}^{\epsilon_\nu} M_{jl}^{\bar{\sigma}} M_{mi}^{\sigma} \delta_+(\tau, \tau_i - \tau_l) \right\rangle_{MC} \quad (3.44)$$

となる。

### 3.3.3 cf 相関関数

ここでは局在電子と伝導電子の相関関数について考える。これは次のように書かれる：

$$\langle X_{\sigma\sigma}^{\mu H}(\tau) c_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'} \rangle = \frac{1}{Z_1} \int \mathcal{D}q \langle \langle T_\tau \hat{W}(q) X_{\sigma\sigma}^\mu(\tau) c_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'} \rangle \rangle \quad (3.45)$$

被積分関数の部分は伝導電子と局在電子の寄与に分けることができ

$$\left\langle \frac{\langle T_\tau \hat{W}_f(q) X_{\sigma\sigma}^\mu(\tau) \rangle_f \det D_{\sigma'}^{(k_{\sigma'}+1)}}{\langle T_\tau \hat{W}_f(q) \rangle_f \det D_{\sigma'}^{(k_{\sigma'})}} \right\rangle_{MC} \quad (3.46)$$

となる。前者に関してはある状態  $q$  について、 $\mu$ -擬スピンにおける時刻  $\tau$  の状態がスピン  $\sigma$  であれば 1 となり、そうでなければ 0 となる。これを  $\gamma_\sigma^\mu(\tau)$  ( $= 0$  or  $1$ ) と書く。後者に関しては 3.3.1 で考えたものと同じであり、グリーン関数の同時刻成分を各状態  $q$  について考えてやればよい。こうして cf 相関関数は

$$\langle X_{\sigma\sigma}^{\mu H}(\tau) c_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'} \rangle = \left\langle \gamma_\sigma^\mu(\tau) \left[ g_{\sigma'}(-0) - \sum_{i,j=1}^{k_{\sigma'}} g_{\sigma'}(-\tau_j) [M_{\sigma'}^{(k_{\sigma'})}]_{ji} g_{\sigma'}(\tau_i) \right] \right\rangle_{MC} \quad (3.47)$$

から計算することができる。

## 4 不純物 $f^2$ 系に対する結果

Pr スクッテルダイトや U 化合物の中には基底状態が結晶場一重項であり、それよりもエネルギーの高い結晶場三重項と準四重項を形成しているものがある。しかし、これらの物質の中には近藤効果が観測されるものとそうでないものがあり、これは結晶場シングレットと近藤シングレットの競合による結果であると考えられる。このような結晶場効果と近藤効果の競合系は理論的にスケーリング理論 [21] や数値繰り込み群 [22, 23, 24] によって U 化合物に適用された。一方 Pr スクッテルダイトについては NCA[25] や NRG[26] を用いた解析が行われたが、これらの手法は物理量の温度変化を精度よく求めることができなかった。本章では CT-QMC を用いて結晶場効果と近藤効果を内包する ST 近藤モデルを解析する。

温度グリーン関数法では松原振動数表示の物理量が得られるが、実振動数へ解析接続してやる必要がある。解析的な表式が与えられていれば  $i\varepsilon_n, i\nu_n \rightarrow \omega + i\delta$  と置き換えてやるだけである。しかし数値的に解析接続する場合には大きな問題となる。この問題を扱う方法としてはパデ近似 [27]、最大エントロピー法 (maximum entropy method, MEM)[28]、積分方程式を援用する方法 [29] が挙げられる。パデ近似は関数形を有理関数で近似するというもので汎用性の高い方法であるが、モンテカルロ法による統計誤差や数値誤差に敏感であるという欠点を持つ。MEM は情報理論を用いて統計誤差も一緒に処理しながら解析接続を行うものであるが、この手法による結果の精度は経験によるところが大きい。また、積分方程式を援用する方法は適用できる問題に強い制限がある。パデ近似はモンテカルロ法には上述の理由により使用不可能と考えられていたが、CT-QMC は松原振動数の物理量を非常に精度良く求められているため適用可能である [20]。本論文では数値的解析接続の方法としてパデ近似を用いる。

### 4.1 一重項・三重項近藤モデルの性質

本章で扱うハミルトニアンは次のようなものである：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + 2(J_1 \mathbf{S}_1 + J_2 \mathbf{S}_2) \cdot \mathbf{s}_c \quad (4.1)$$

2 とは相互作用定数が 2 倍だけ違うことを注意しておく。今  $\Delta_{\text{CEF}} = 0$  としたが、2 章で見たように有効的な結晶場分裂が現れる。ST 近藤モデルは近藤モデルの拡張になっており、 $f^1$ ,  $f^2$  電子系両方の物理を含んでいる。伝導電子のバンドとしては長方形 (2.6) を採用し、エネルギーの単位系を  $D = 1$  とする。ST 近藤モデルの性質はパラメータ

$J_1/D, J_2/D$  によって支配される。本節では ST 近藤モデル特有の物理量および既知の事実についてレビューする。

#### 4.1.1 相関関数とシングレット占有率

局在スピンの相関関数として次の量を定義する：

$$\chi_{\sigma\sigma'}^{\mu\nu}(\tau) = \langle T_\tau \tilde{n}_{\mu\sigma}^H(\tau) \tilde{n}_{\nu\sigma'} \rangle \quad (4.2)$$

ここで  $n_{\mu\sigma} = X_{\sigma\sigma}^\mu$  は擬スピン  $\mu$  の  $\sigma$  成分の粒子数演算子であり、また、 $\tilde{n}_{\mu\sigma} = n_{\mu\sigma} - \langle n_{\mu\sigma} \rangle$  は平均値からのずれである。磁場への応答を表す帯磁率は  $\chi_M^{\mu\nu}(\tau) = \langle \tilde{S}_\mu^z(\tau) \tilde{S}_\nu^z \rangle$  と表される。 $S_\mu^z = \sum_\sigma \sigma n_{\mu\sigma}$  は擬スピン  $\mu$  の持つ磁気モーメントである ( $\sigma = \pm 1/2$ )。今磁場がかかっていないとすると

$$\frac{\chi_M^{\mu\nu}(\tau)}{C} = \sum_\sigma [\chi_{\sigma\sigma}^{\mu\nu}(\tau) - \chi_{\sigma\bar{\sigma}}^{\mu\nu}(\tau)] \quad (4.3)$$

と書くことができる。 $C = 1/4$  はスピン  $1/2$  の場合のキュリー定数である。この帯磁率は  $\chi_M^{\mu\nu} = \chi_M^{\nu\mu}$  という対称性を持っている。実際の物理的な磁気モーメント  $J_z$  は  $J_z = \sum_\mu a_\mu S_\mu^z$  によって与えられ、これに対応した帯磁率は  $\chi_J(\tau) = \sum_{\mu\nu} a_\mu a_\nu \chi_M^{\mu\nu}(\tau)$  と表される。係数  $a_\mu$  は局在状態の波動関数に依存している [30]。本論文ではそれぞれの擬スピンの応答を分けて求め、帯磁率  $\chi_M^{\mu\nu}$  を示すことにする。磁気双極子のみでなく、四極子など他の多極子も擬スピン  $\mathbf{S}_1$  と  $\mathbf{S}_2$  を用いて表すことができる。

異なる擬スピン間の相関関数  $\chi_M^{12}$  を用いてシングレット占有率も考えることができる。シングレットへの射影演算子  $P_s$  は  $P_s = -\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + 1/4$  となり、トリプレットへの射影演算子は  $P_t = 1 - P_s$  となる。等方的な系では、シングレット占有率は

$$\langle P_s \rangle = \frac{1}{4} \left( 1 - 3 \frac{\chi_M^{12}(\tau=0)}{C} \right) \quad (4.4)$$

と表される。高温では2つの擬スピン間には相関は無く、(4.4) から  $\langle P_s \rangle = 1/4$  となることがわかる。

モンテカルロシミュレーションにおいて、統計誤差は20個のデータから見積もっている。また、実振動数の動的な物理量を得るためには解析接続が必要であるが、本研究ではパデ近似を用いる。この方法は統計誤差を考えないが、CT-QMC によって得られるデータは十分精度がよく、[20] で示されているようにパデ近似を適用することができる。特に低温では松原振動数の間隔が  $2\pi T$  に従って狭くなっていくため、パデ近似はよくスペクトルを再現する。

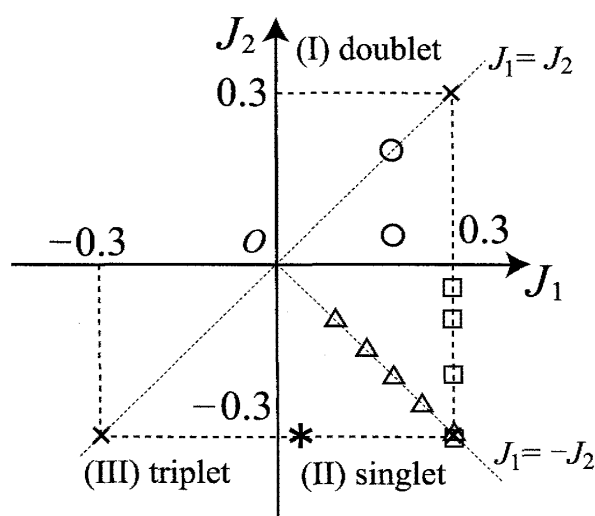


図5  $\Delta_{\text{CEF}} = 0$  における ST 近藤モデルの模式的相図。この系の性質は直線  $J_1 = J_2$  に関して対称である。

ST 近藤モデルは粒子-ホール対称性を持っており、一粒子励起スペクトルにはこの性質が現れなければならない。このことは1粒子グリーン関数や $t$ -マトリックスが松原振動数表示で純虚数であることと対応している。ゆえに数値解析接続を行う際、統計誤差によって生じた実部を無視する(統計誤差の範囲でゼロになっている)。このため本章で示すスペクトルは全てこの対称性を持っている。

#### 4.1.2 パラメータ空間の概観

まずパラメータ空間を3つの領域 (I)  $J_1, J_2 > 0$ , (II)  $J_1 > 0, J_2 < 0$ , (III)  $J_1, J_2 < 0$  に分ける。図5は  $\Delta_{\text{CEF}} = 0$  における相図を模式的に表したものである。それぞれの領域における基底状態はそれぞれ (I) ダブルット, (II) シングレット, (III) トリプレットである。もともと ST 近藤モデルにおいて局在状態は4つの自由度を持っており、基底状態での残留エントロピーは直感的には (I) 近藤効果, (II) 結晶場シングレット, (III) 結晶場トリプレットを考えることで理解される。NRG[15] によれば、シングレットとダブルットの境界は  $J_1$  軸付近の領域 (II) にある。しかしこの境界は結晶場効果のエネルギースケールが小さすぎるため、CT-QMC では見ることができなかった。

次にパラメータ空間の性質について説明する。結合定数  $J_\mu$  が正の方向に大きくなると、近藤効果が強くなる。一方、空間上の点  $(J_1, J_2)$  が  $J_1, J_2$  軸から離れると有効結晶場(2.19)に対応して結晶場分裂が大きくなる。また、 $(J_1, J_2)$  が直線  $J_1 = -J_2$  に沿って原点  $O$  から離れるとこれら2つの効果はともに強くなる。ゆえに、これらの競合がこの直

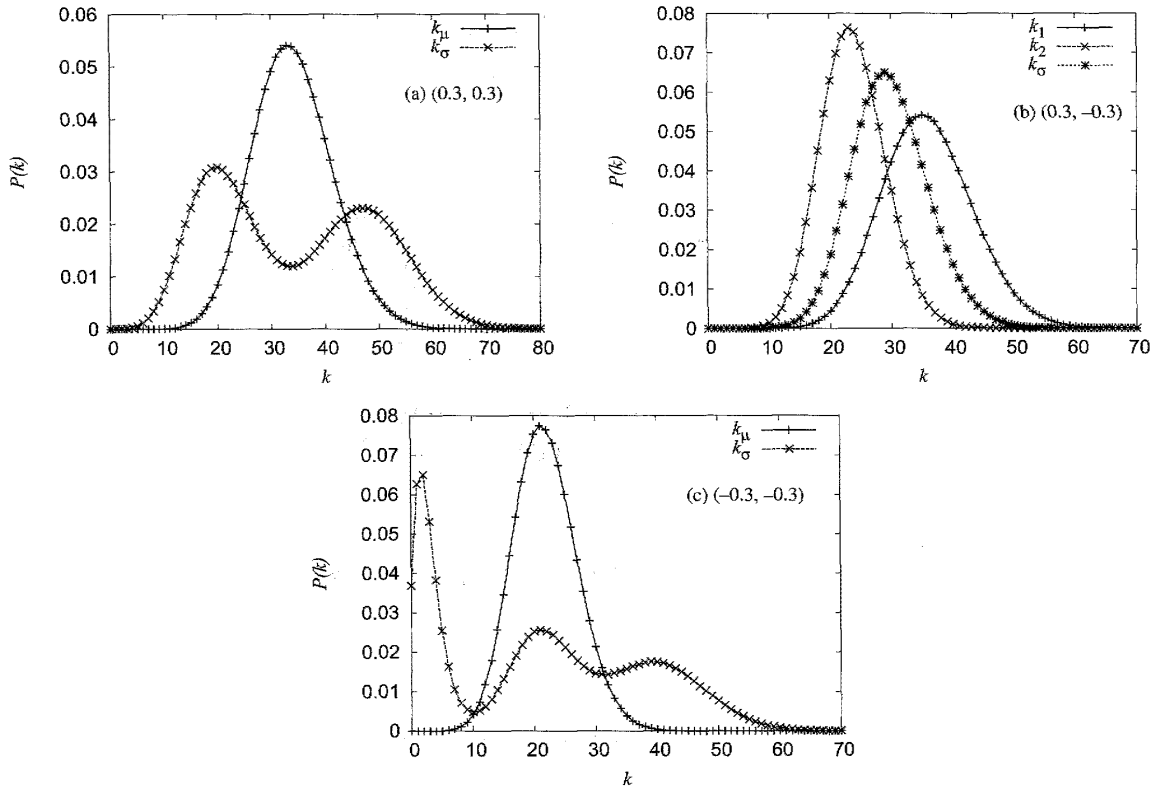


図6  $T = 0.01$  における確率分布。(a) 領域 (I), (b) 領域 (II), (c) 領域 (III) の場合。パラメータは図5に×印で示してある。

線上で起こることが予想される。

4.3 節では近藤効果と結晶場効果の競合について議論するが、この2つの効果の特徴的なエネルギースケールを押さえておくことは重要である。前者は近藤温度 (2.7) で、後者は有効結晶場分裂 (2.19) によって与えられる。ここでこれらの比を定義しておく：

$$r \equiv \frac{T_K}{\tilde{\Delta}_{\text{CEF}}} \quad (4.5)$$

このパラメータを使うと、直感的には  $r \ll 1$  では近藤効果が無視され、 $r \sim 1$  で近藤効果と結晶場効果の競合が起こると期待される。 $T_K$  と  $\tilde{\Delta}_{\text{CEF}}$  は相互作用が十分小さいと仮定して得られた量であるため、 $r$  はあくまで目安となる量であることを注意しておく。4.3 節ではこのパラメータと共に議論することにする。

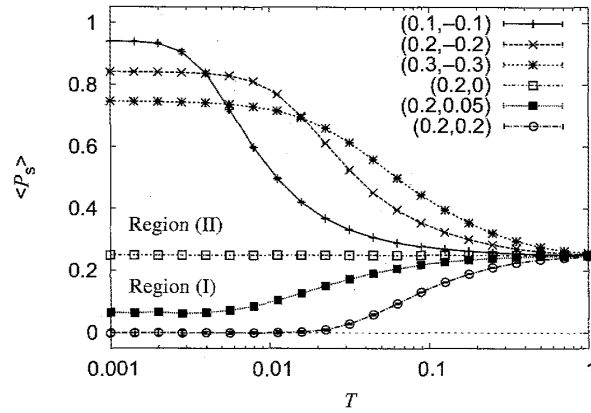


図7 シングレット占有率の温度変化。 $(J_1, J_2)$  は図5に $\Delta$ 及び $\circ$ 印として示してある。

## 4.2 モンテカルロシミュレーションと結晶場効果

図6に $k_\mu$ と $k_\sigma$ に関する確率分布を示す。領域(I)では $k_\sigma$ の確率分布は2つのピークを持っており、これはスピン揺らぎを表している。領域(I)のモンテカルロシミュレーションでは、 $\uparrow$ スピンが左の山にあるとき $\downarrow$ スピンは右側の山にいる。低温ではこれら2つのピークは完全に分離する。このときそれぞれのスピンが異なる山にトラップされてしまい、全位相空間 $\{q\}$ を動けなくなってしまう。このままではエルゴード性を満たしていないことになるが、スピンスピンフリップによってこれら2つのピークを混ぜることができる。一方で領域(II)ではスピンスピンフリップは必要なく、確率分布のピークは一つしかない。

領域(III)において、 $k_\sigma$ に関する確率分布は3つのピークを持っている。これは結晶場効果によってシングレットから分裂したトリプレットの3成分間での揺らぎを表している。領域(III)のモンテカルロシミュレーションでは $\uparrow$ スピンが左の山にあるときは $\downarrow$ スピンは右の山にあり、これは領域(I)と同じである。一方 $\uparrow$ スピンが中央にあるとき、 $\downarrow$ スピンも中央の山にある。低温ではこれらのピークは完全に分離し、スピンスピンフリップを使っても全ての位相空間を動き回ることはいできない。よって、領域(III)におけるこの問題を解決するためには端の2つのピークと中央のピークを混ぜる操作が必要である。

次にシングレット占有率の観点から結晶場効果について考える。図7は領域(I), (II)におけるシングレット占有率の温度変化である。 $\langle P_s \rangle$ における温度変化の特徴的なエネルギースケールは結晶場分裂の大きさによって決定される。 $(J_1, J_2) = (0.2, 0.2)$ では、低温でシングレット占有率は完全にゼロになる。これは $J_1 = J_2 (I_s = 0)$ を反映しており、このときシングレット状態は完全に排除されている。しかし $(J_1, J_2) = (0.2, 0.05)$ ではト

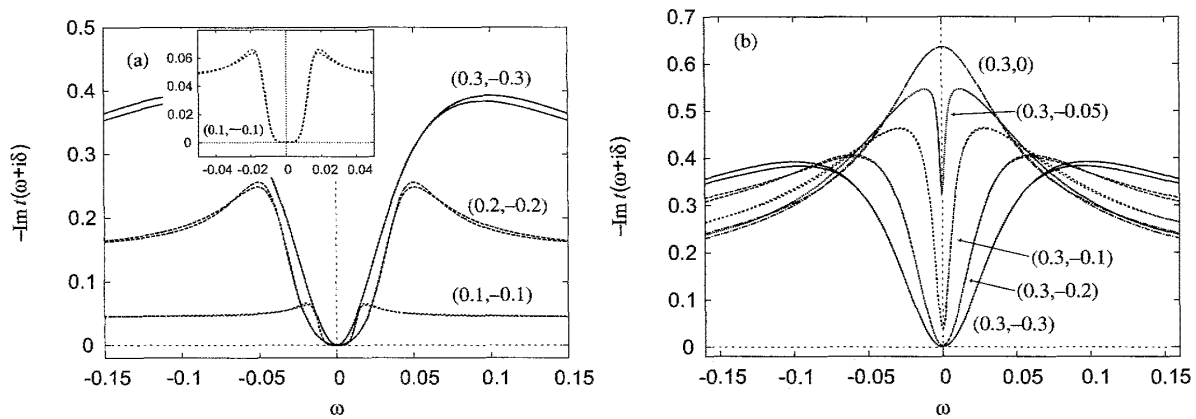


図8 領域(II)の $T = 0.001$ における $t$ -マトリックス。(a) $J_1 = -J_2$ と(b) $J_1 = 0.3$ の場合。ここでも領域(I)のように2本の線が描いてある。パラメータ $(J_1, J_2)$ は図5に(a)△印と(b)□印で示している。

リプレットはシングレットと混ざって $\langle P_s \rangle \neq 0$ となる。

一方、領域(II)でのシングレット占有率は低温でも1にはならない。しかし $(J_1, J_2) = (0.1, -0.1)$  ( $r = 0.0033 \ll 1$ )の場合、 $\langle P_s \rangle$ は1に近づいている。これは結晶場効果が近藤効果に比べて強いことを示唆しており、結晶場描像が成り立っていると考えられる。相互作用を大きくして $(J_1, J_2) = (0.3, -0.3)$  ( $r = 0.29 \sim 1$ )とすると、近藤効果が効いて $\langle P_s \rangle$ は小さくなる。

### 4.3 領域(II)における結果

本節では基底状態がシングレットである領域(II)について議論する。ここでは近藤効果と結晶場効果が競合し、その結果が系の振る舞いを決定する。

#### 4.3.1 $t$ -マトリックス

図8に領域(II)における $t$ -マトリックスを示す。これを見ると領域(II)におけるスペクトルはギャップ構造を持つことがわかる。まず $r$ の小さいところから話を始める。 $(J_1, J_2) = (0.1, -0.1)$  ( $r \ll 1$ )の場合、スペクトルはステップ関数に近い形状<sup>\*2</sup>をしている(図8(a)の中に拡大図がある)。これは結晶場効果が近藤効果よりも支配的であることを表している。結晶場によって準四重項が分裂してエネルギーギャップができ、これより

<sup>\*2</sup> この振る舞いは伝導電子のバンドが切り立っていることと関係している。もし伝導電子の状態密度としてガウシアンを用いれば変化は滑らかになる。

もエネルギーの小さい伝導電子は散乱されない。しかし  $(J_1, J_2) = (0.3, -0.3)(r \sim 1)$  の場合スペクトルは  $\omega \sim \pm 0.1$  のあたりに幅の広いピークを持つが、フェルミ準位の値は変わらずゼロになっている。

$J_1 = 0.3$  における  $t$ -マトリックスを図 8(b) に示す。 $J_1$  を固定して  $|J_2|$  を増加させると結晶場効果  $\tilde{\Delta}_{\text{CEF}}$  が強くなり、近藤温度  $T_K$  の大きさは変わらない。これらの比である  $r$  は  $|J_2|$  を減少させると増加し、結晶場効果は弱くなる。 $J_2 = -0.05$  と  $-0.1$  ではフェルミ準位における値がゼロではないが、これは結晶場分裂に比べて十分温度が低くないことが原因であり、十分低温ではゼロになると思われる。 $|J_2|$  が小さくなると結晶場分裂の大きさを反映してギャップが狭くなる。 $J_2 = -0.3(r \sim 1)$  では 2 つのブロードなピークがあったが、 $|J_2|$  が減少するにつれてお互いに近づき、 $J_2 = 0(r = \infty, \text{近藤モデルに一致する})$  でひとつになり、近藤ピークを形成する。ゆえにこのブロードなピークは近藤効果を反映していると考えられる。

#### 4.3.2 動的帯磁率

図 9 は低温における 2 粒子励起スペクトル  $\text{Im} \chi_M^{\mu\nu}(\omega + i\delta)/\omega C$  である。帯磁率は  $\chi_M^{12} = \chi_M^{21}$  という対称性があり、パデ近似の確認のために  $\chi_M^{12}$  として 2 本描いている。また、 $\chi_M^{12} < 0$  は擬スピン間の相関が反強磁性的であることを反映している。 $J_1 \lesssim 0.25$  では 2 粒子励起スペクトルに非弾性ピークが見られるが (図 9(a)–(c)), これは結晶場シングレットからトリプレットへの励起に対応するものと考えられる。一方で  $J_1 = 0.3$  では非弾性ピークは消えてしまう (図 9(d))。その代わりにスペクトルはブロードな準弾性ピークを示している。

次にこの 2 粒子励起スペクトルを、局在状態の 1 粒子励起スペクトルを表す  $t$ -マトリックスと比較する。図 8 に示したように、 $t$ -マトリックスはギャップ構造を持っており、その形状は相互作用の強さに依存している。 $r \ll 1$  のとき (図 8(a)(0.1, -0.1) および図 9(a)), 1 粒子励起スペクトルはステップ関数の形を持ち、2 粒子励起スペクトルはギャップに対応した非弾性ピークを示す。これから結晶場効果が支配的で近藤効果は無視できることがわかる。一方で  $r \sim 1$  の場合 (図 8(a)(0.3, -0.3) および図 9(d)), 1 粒子スペクトルはギャップを持ち続けるが 2 粒子励起スペクトルは準弾性ピークのみを持つ。つまり、 $r \sim 1$  の場合の系は結晶場効果と近藤効果の特徴をあわせ持っている。この異常な振る舞いはこれら 2 つの効果の競合によって得られたものであり、もはや結晶場描像は成り立っていない。

今度は異なる観点から動的帯磁率について考えてみる。ST 近藤モデルは (2.11) の形で書くこともできる。この表示では演算子  $\mathbf{X}^t$  はトリプレット間の混成であり、 $\mathbf{X}^s$  はトリ



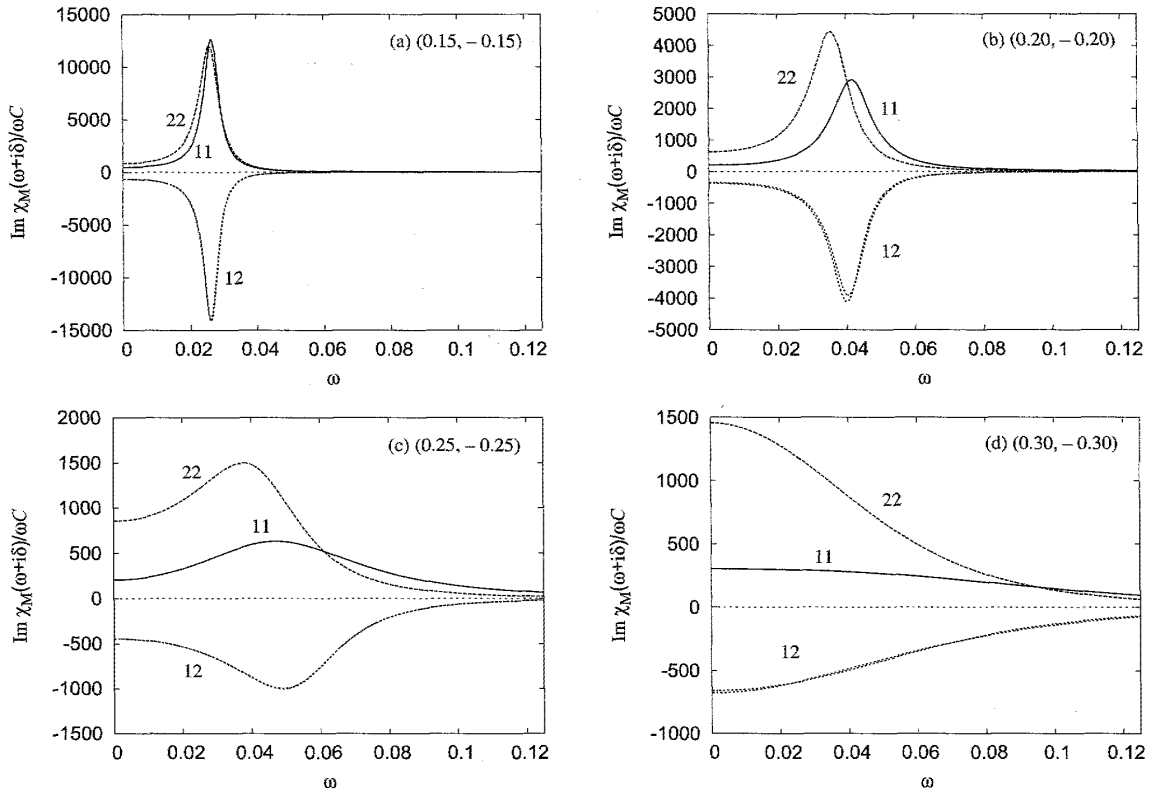


図9  $J_1 = -J_2$  での  $T = 0.001$  における2粒子励起スペクトル。パラメータは図5に△印で示している。

プレットとシングレットを混ぜるものである。これらを使って次のような相関関数を定義することができる：

$$\chi_{t,s}(\tau) = \langle X_z^{t,s}(\tau) X_z^{t,s} \rangle = \chi_M^{11}(\tau) + \chi_M^{22}(\tau) \pm 2\chi_M^{12}(\tau) \quad (4.6)$$

図9では  $J_1 = -J_2$  という条件を課したが、これは  $I_t = 0$  を意味する。 $r \ll 1$  (図9(a)) の場合、 $\chi_t \simeq 0$  であることがわかる。これは演算子  $\mathbf{X}^t$  が無いためにトリプレット間の相関がほとんど無いためである。しかし相互作用を大きくすると (図9(b)-(d))、演算子は  $\mathbf{X}^s$  しか無いにもかかわらず  $\chi_t \neq 0$  となる。

これに加えて  $J_1 < |J_2|$  かつ  $J_1 \rho_c \ll 1$  の場合について考える (図5に\*印で示してある)。このパラメータでは  $I_t$  は負であり、 $r$  の値は1に比べて十分小さい。このとき、 $\chi_t \simeq 0$  であり、2粒子励起スペクトルには非弾性ピークが見られる (スペクトルの形状は図9(a) とほとんど同じである)。今は  $I_t \neq 0$  であるが、 $(J_1, J_2) = (0.1, -0.1)$  と同じ結果が得られるということから負の  $I_t$  が低エネルギーで0にスケールされていると考えられる。それゆえ、 $\chi_t \neq 0$  という結果は大きな反強磁性結合  $J_1$  によって生じるものであ

る。近藤効果の力を借りてトリプレット間が混じりが生じるのである。この相互作用によって系の振る舞いは結晶場描像からはずれ、基底状態は結晶場シングレットよりも安定なシングレットへと変化する。1 不純物問題の近藤効果と同じように、このシングレット基底状態は伝導電子と密接に関わっているものと思われる。本章で得られた結果は物理的な近似を一切使っておらず、統計誤差の範囲で数値的に厳密である。

## 5 $f^1$ および $f^2$ 配置を持つ格子系の秩序状態

本章ではハーフフィリング及びその近傍において、近藤格子と ST 近藤格子の秩序状態を動的平均場理論と連続時間量子モンテカルロ法を組み合わせることによって考察する (DMFT+CT-QMC)。格子は無限次元の超立方格子を使っており、状態密度はガウシアンで与えられる：

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{D} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-2(\varepsilon/D)^2} \quad (5.1)$$

$D$  はバンド幅の目安となる量である。以下の結果では  $D = 1$  という単位系を採用している。

### 5.1 近藤格子モデル

ここでは近藤格子の反強磁性秩序状態について述べる。本章で扱うハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + 2J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_{ci} \quad (5.2)$$

で与えられる。無限次元における近藤格子の基底状態は、大槻らによって常磁性状態の不安定性から解明されている [31]。本論文でのパラメータの選び方はこの文献と同じようにしている。ハーフフィリングの超立方格子は波数  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \dots)$  でネスティングがあるため、低温で反強磁性秩序を形成する。伝導電子スピンと局在スピンの相互作用  $J$  が小さいとき、RKKY 相互作用によって生じる局在スピン間の反強磁性相互作用によってこの秩序は理解される。実際の転移温度の計算と平均場近似による転移温度の計算の一致から、 $J \lesssim 0.1$  の領域で RKKY 的な描像が成り立つことがわかる。

$J$  が大きくなると、反強磁性転移温度は増加するがある値で減少に転じ、 $J_c$  で反強磁性相は消えてしまう。RKKY 相互作用が伝導電子を媒介として磁気秩序を安定化しようとするのに対し、近藤効果によって局在スピンと伝導電子がシングレットを作ろうとするので、これらの競合によって  $J = J_c \simeq 0.27$  で常磁性-反強磁性転移が起こる。このような

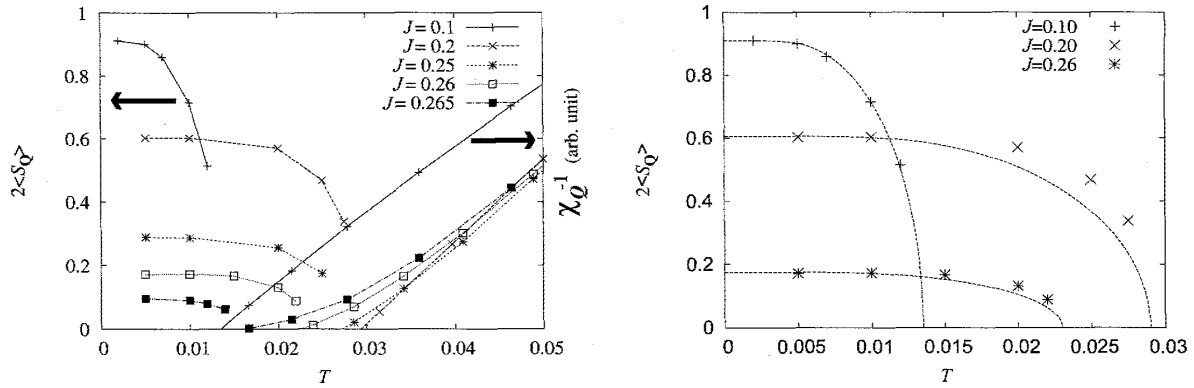


図 10 反強磁性モーメントの温度変化。(a) には常磁性状態での逆帯磁率  $\chi_Q^{-1}$ , (b) には平均場近似によるフィッティングの結果を一緒に描いている。逆帯磁率のデータは大槻氏に提供していただいた。

基底状態で起こる相転移は量子相転移と呼ばれる。本節では秩序状態について詳細に議論する。近藤格子の有限温度の秩序状態を調べたのは本研究が初めてである。

### 5.1.1 ハーフフィリングでの秩序状態

図 10 に反強磁性モーメント  $\langle S_Q^z \rangle$  の温度変化を示す。いま A,B 部分格子を仮定して計算しているが、縦軸に書いてある量は実空間スピン  $S_i$  のフーリエ変換の反強磁性成分として

$$S_Q = \frac{1}{N} \sum_i S_i e^{iQ \cdot r_i} = \frac{1}{2}(S_A - S_B) \quad (5.3)$$

のように定義される。これは反強磁性があるときにゼロでない量となる。転移点近傍では数値計算の収束が遅いために計算が難しく、モーメントの大きさはプロットしていない。図 10(a) には大槻らによって計算された常磁性状態での逆帯磁率  $\chi_Q^{-1}$  の温度変化も一緒に描いてあり、これがゼロになる (帯磁率が発散する) ときに波数  $Q$  の秩序、つまり反強磁性が起こる。このように帯磁率の発散で転移温度を見積もる方法と、2 つの部分格子を仮定して反強磁性モーメントを計算することによって転移温度を決める方法の 2 つが考えられるが、図 10(a) を見るとこれらは一致することが確認できる。モーメントの大きさは相互作用  $J$  が小さいときは最大値 1 に近く、大きくなるとその大きさは抑えられ、 $J = J_c$  でゼロになる。

一方図 10(b) はモーメントを平均場近似でのモーメントの関数形でフィットしたものである。その関数形  $m(T)$  は絶対零度でのモーメントの大きさ  $m_0$  と転移温度  $T_{AF}$  から決

まり次のようになる：

$$m(T) = m_0 \tanh \left( \frac{m(T)}{m_0} \frac{T_{AF}}{T} \right) \quad (5.4)$$

これを見ると  $J$  が小さいとき ( $J = 0.10$ ) は平均場近似の関数形によってモーメントの形が完全に再現されている。しかし  $J$  が大きくなると ( $J = 0.20, 0.26$ ) 平均場近似からはずれ、転移点でのモーメントの発生の仕方が平均場近似で期待される形からはずれる。DMFT は平均場近似の一種なので  $T \sim T_c$  でのモーメントは  $\propto (T_c - T)^{1/2}$  に従って発生すると考えられるが、近藤効果のために RKKY 相互作用の平均場近似で全温度領域をフィットすることは不可能になっている。

### 5.1.2 秩序相における状態密度

本節では秩序相の状態密度について議論する。今 2 つの部分格子があるので、原点グリーン関数は  $G_{A\sigma}$  と  $G_{B\sigma}$  の 2 つがある。各サイトにおいて伝導電子のフィリングを固定した場合には  $G_{A\sigma} = G_{B\sigma}$  という関係があるので A サイトのみ考えれば十分である。さらにハーフフィリングの場合、系は粒子-ホール対称性を持つのでこの要請からスペクトルは  $\rho_{\uparrow}(\omega) = \rho_{\downarrow}(-\omega)$  という関係を持たなければならない。結局、ハーフフィリングの場合  $G_{A\uparrow}$  のみを考えれば良いということになる。また、数値的解析接続の方法としてはパデ近似を用いている。

図 11 に伝導電子の状態密度  $-\text{Im} G_{A\uparrow}(\omega + i\delta)/\pi$  の温度変化を示す。図中には各パラメータごとに A 部分格子状態密度  $\rho_{A\uparrow}(\omega)$  および  $\rho_{A\downarrow}(-\omega)$  を描いている。上述したようにこれらは一致するはずであり、このことはパデ近似の妥当性を表している。どのパラメータにおいても低温でギャップ構造を持ち、絶縁体となっている。まず図 11(a)  $J = 0.10$  を見ると  $\omega \simeq -0.1$  に鋭いピークがあり、降温とともに成長しているのがわかる。また、高振動数側は相互作用が無いときの状態密度とほとんど変わっていない。前に見たようにこのパラメータは RKKY 描像が成り立つと考えられ、近藤効果はほとんど効いていない。 $\omega \simeq -0.1$  のピークやギャップは、局在スピンの反強磁性秩序したことによって生じるスタグガード磁場を伝導電子が感じることによって生じたものである。

次に図 11(b)  $J = 0.20$  および (c)  $J = 0.26$  を見ると、相互作用が大きくなると鋭いピークは次第に消えるがギャップは残り続ける。このときスタグガード磁場が減少するので、ギャップも小さくなるように思われるがそうはなっていない。一方  $J \gtrsim 0.27$  で秩序相は消えるが、このときも状態密度にはギャップが存在しその形は  $\omega = 0$  について対称にな

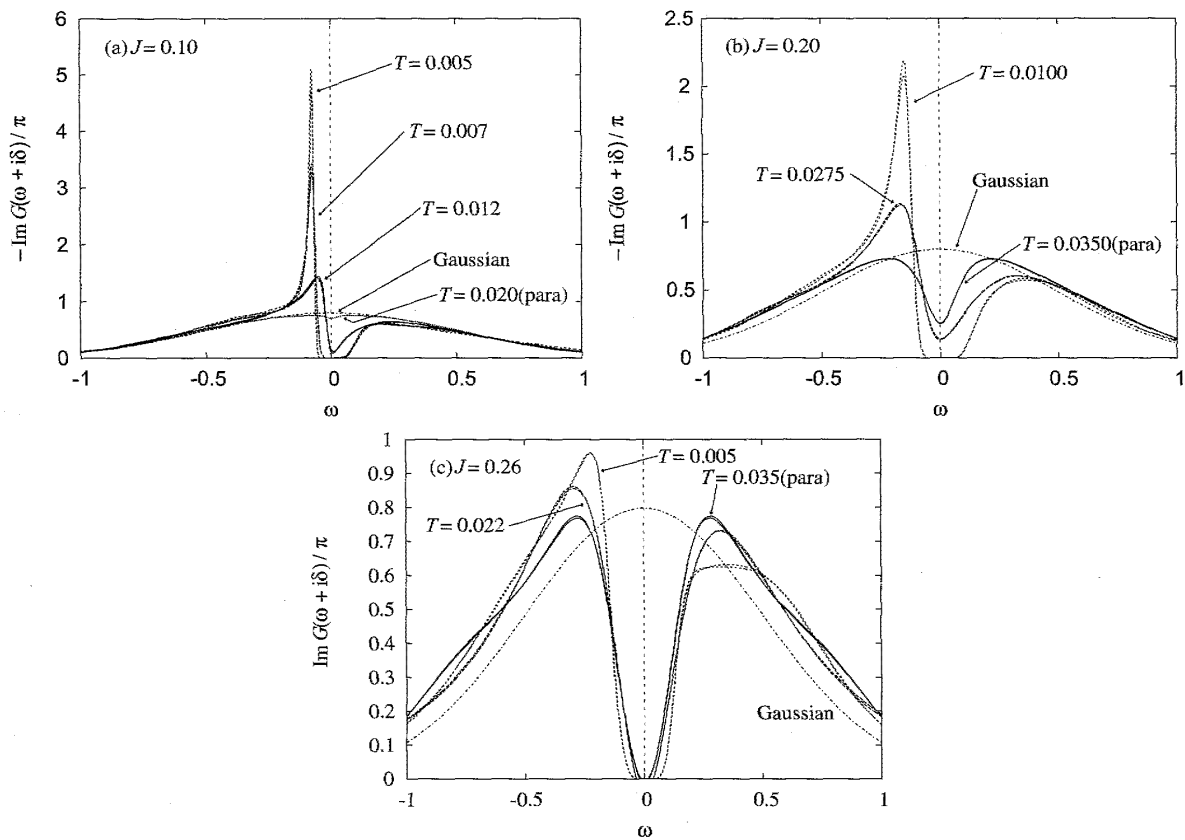


図 11 伝導電子の温度変化。相互作用が無いときの伝導電子の状態密度も一緒に描いてある。

る。これは近藤効果による伝導電子と局在電子の「混成ギャップ」\*<sup>3</sup>であり、局所的にできたシングレットを壊して励起状態を作るために必要なエネルギーである（近藤絶縁体）。ゆえに図 11(c) の量子臨界点近傍の反強磁性相におけるギャップの起源は近藤絶縁体とスタaggered 磁場の両方あると考えられる。このことは図 11(b) の転移前の温度  $T = 0.035$  から「混成ギャップ」の形成が始まっていることとも関連している。

図 12 は基底状態における状態密度を  $J$  を変えてプロットしたものである。今部分格子について和をとった状態密度を描いているため、 $\omega = 0$  で対称な形をしている。 $J = 0.30$  は常磁性相であるが、このときは近藤絶縁体を反映したギャップが空いている。 $J$  を小さくして反強磁性相に入っても、状態密度に特異な振る舞いは見られず連続的に変化していることがわかる。さらに  $J$  を小さくするとギャップ端にピークが成長し、反強磁性を反映している。

\*<sup>3</sup> 近藤格子モデルでは局在電子は完全に局在しているため、実際の混成はない。しかし近藤効果によって伝導電子と局在電子の間に有効的な混成が生じるため、ここでは括弧を付けて「混成ギャップ」と呼ぶことにする。

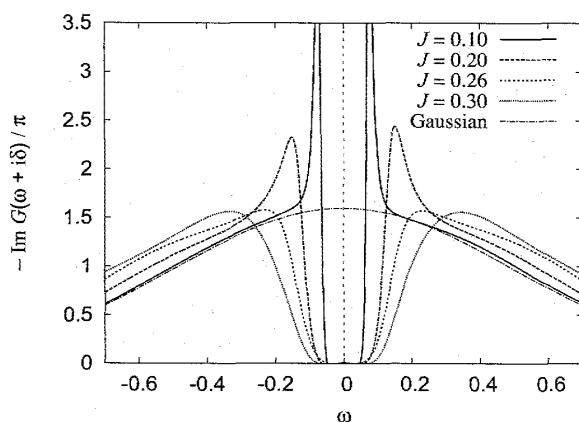


図 12 基底状態における伝導電子状態密度の  $J$  依存性。 $\uparrow, \downarrow$  について和をとったものをプロットしている。

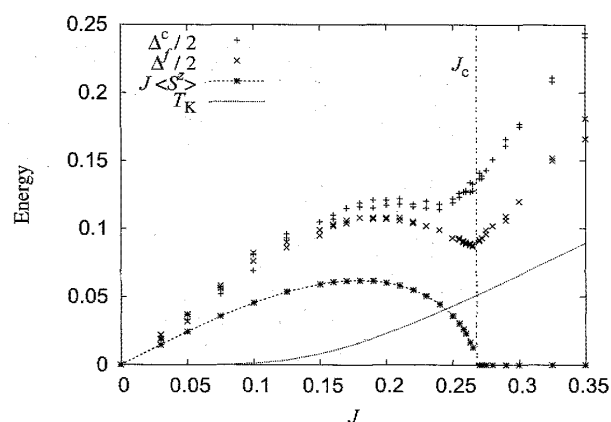


図 13 反強磁性相における状態密度のギャップの  $J$  依存性。近藤温度は超立方格子におけるものを用いている。

次に基底状態におけるギャップの  $J$  依存性について議論する。図 13 は伝導電子状態密度と  $t$ -マトリックスに現れるギャップ  $\Delta^c, \Delta^f$ , を  $J$  の関数として示したものである。ギャップの大きさはギャップ端ピークの半分の値によって定義している。近藤効果によるギャップのエネルギースケールは近藤温度  $T_K$  によって与えられると考えられる。一方反強磁性相では局在スピンの分極したことによる内部磁場を伝導電子が感じてギャップを生ずるが、この大きさは (5.2) より  $J\langle S^z \rangle$  である。図 13 にはこの 2 つも一緒に描いてある。ギャップを求める際に数値的解析接続を行うため、定量面には限界があることを注意しておく。図 13 中ではパデ近似の確認のために、各  $J$  に対して 2 つの異なる計算によるデータをプロットしている。

$J > J_c$  の常磁性相では  $J$  の減少と共にギャップは  $T_K$  のエネルギースケールで小さくなる。このとき  $\Delta^c, \Delta^f$  は互いに異なる値をとる。秩序相への入り方は  $\Delta^c, \Delta^f$  共に連続的であるが、 $\Delta^f$  は臨界点で折れ曲がり、反強磁性の効果に敏感に感じて増加に転じる。一方  $\Delta^c$  の変化は滑らかで量子相転移で特異な振る舞いは見られず、秩序相の中の  $J \sim 0.24$  で増加が止まりフラットになる。このような伝導電子と局在スピンの振る舞いの違いは、伝導電子が電荷の自由度を持っていることに起因すると考えられる。これら 2 つのギャップはさらに  $J$  が小さくなると再び減少して  $J = 0$  でゼロになる。 $J \lesssim 0.10$  の RKKY 領域ではギャップの寄与は反強磁性によるスタグガード磁場しかなく、 $\Delta^c \simeq \Delta^f$  となっている。RKKY 領域でギャップの大きさが  $J\langle S^z \rangle$  と一致しないのはギャップをピークの半値として定義しているためである。

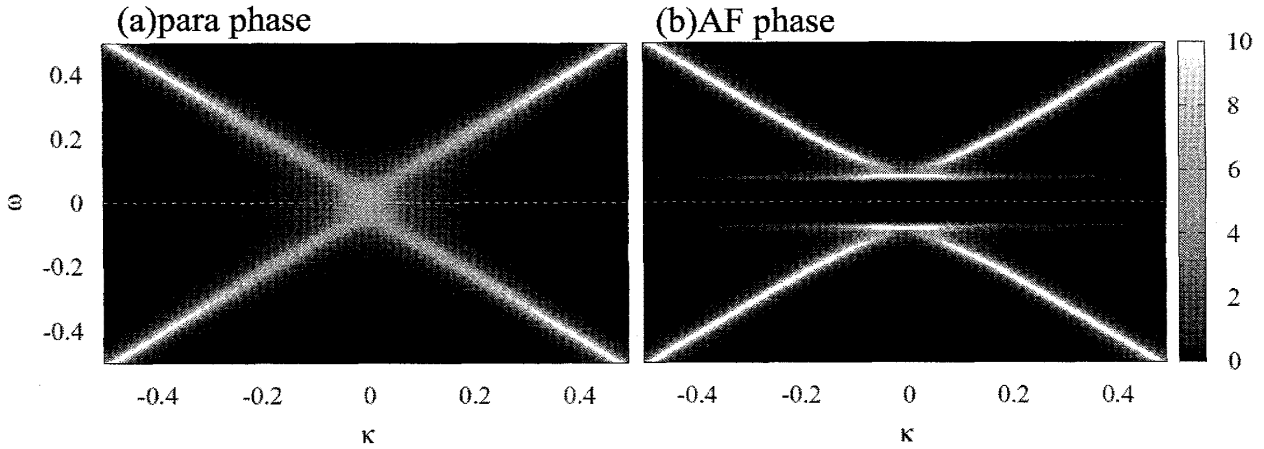


図 14  $J = 0.1$  における 1 励起スペクトル  $A_{\uparrow}(\kappa, \omega)$ 。(a) 常磁性相  $T = 0.020$ , (b) 秩序相  $T = 0.005$  の場合。

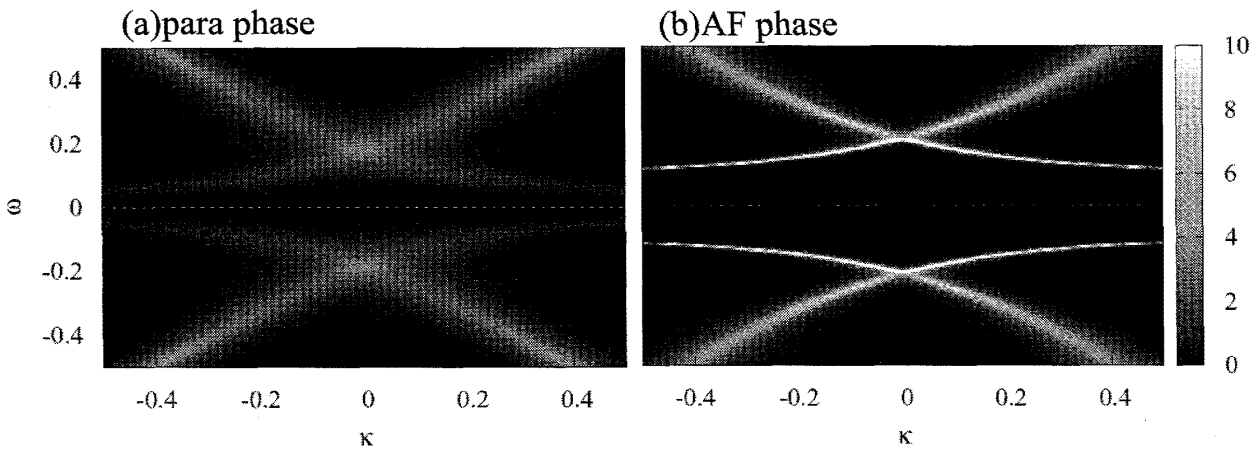
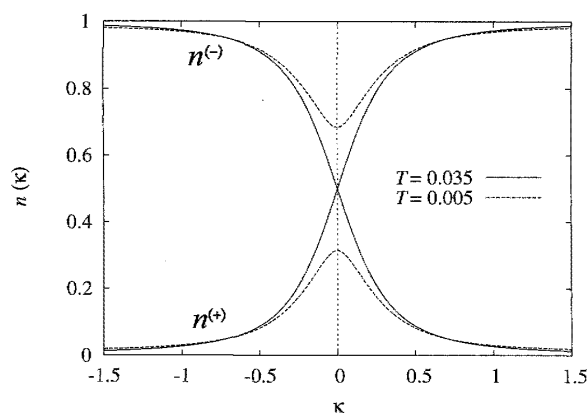


図 15  $J = 0.2$  における 1 励起スペクトル  $A_{\uparrow}(\kappa, \omega)$ 。(a) 常磁性相  $T = 0.035$ , (b) 秩序相  $T = 0.010$  の場合。

### 5.1.3 1 粒子励起スペクトルと運動量分布関数

図 14 と図 15 は反強磁性相内外での 1 粒子スペクトル  $A_{\uparrow}(\kappa, \omega)$  ( $= A_{\downarrow}$ ) である。2 章で述べたように、DMFT では波数依存性は伝導電子のエネルギー  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  のみから入るので  $\kappa = \varepsilon_{\mathbf{k}}$  という記法を用い、これを‘波数’と呼ぶことにする。また、A,B 部分格子を仮定しているためにブリルアンゾーンが半分になる代わりにバンドの数が 2 倍になっている。このために常磁性状態でもバンドが 2 倍になっていることを注意しておく。ハーフフィリングで独立なのは  $\kappa, \omega > 0$  の領域だけである。本来ならば 2 本しかないバンドであるが、


 図 16  $J = 0.2$  における運動量分布関数。

近藤効果による「混成バンド」によってパラメータによっては 4 本あるように見える (サムルールは変わらない)。 $\omega$  の大きいところから 1,2,3,4 と番号を付けると, 1,3 は  $G^{(+)}$ , 2,4 は  $G^{(-)}$  に対応したものになっている ( $G^{(\pm)}$  の定義は 2 章にある)。相互作用が無いときの分散関係は  $\omega = \pm\kappa$  である。

まず  $J = 0.1$  (図 14) を考える。今まで考えてきたようにこのパラメータでは RKKY 描像が成り立っている。常磁性相 (a) を見ると, 相互作用による幅を持っていることを除いて相互作用の無いときの分散  $\omega = \pm\kappa$  とほとんど一致している。一方反強磁性相 (b) ではスタグガード磁場によるギャップが生じ, さらに新しい構造が作られ始めている。新しく現れたバンドは近藤効果による「混成バンド」であると考えられるが, 近藤効果が弱いためにほとんど分散を持っていない。

一方図 15 は  $J = 0.2$  におけるスペクトルである。常磁性相 (a) では近藤効果による「混成バンド」を形成している。また相互作用の幅が広く,  $\omega = 0$  近傍で擬ギャップが生じている。このパラメータにおける反強磁性相 (b) では幅が短くなり, 本物のギャップのように見える。特徴的なのは, 反強磁性相内においても近藤効果が重要であるという事実である。また,  $J = 0.1$  では励起の位置が  $\kappa \sim 0$  であったのに対し,  $J = 0.2$  では近藤効果により  $\kappa \rightarrow \pm\infty$  に変化している。

次に運動量分布関数  $n^{(\pm)}(\kappa)$  を図 16 に示す。低温でも  $\kappa$  方向にブロードに広がっているが, これは近藤効果が低温で量子揺らぎを与えているからである。ここには示していないが,  $J = 0.10$  では量子揺らぎが小さくなり, 分布関数の広がり狭くなる。また, 反強磁性相では  $\kappa = 0$  にスタグガード磁場を反映してギャップが空いている。運動量分布関数におけるギャップと低温でのブロードな変化は, 反強磁性と近藤効果の共存を反映している。



## 5.2 一重項・三重項近藤格子モデル

近藤格子に対して適用した DMFT+CT-QMC という手法は ST 近藤格子 (2.17) に対しても同じように適用することができる。不純物モデルでそうであったように、結晶場分裂の項をゼロにした次の格子モデルを扱う：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \sum_i (2J_1 \mathbf{S}_{1i} + 2J_2 \mathbf{S}_{2i}) \cdot \mathbf{s}_{ci} \quad (5.5)$$

ここでも無限次元超立方格子を採用する。前節と同様、超立方格子はハーフフィリングでネスティングがあるので、ネール秩序<sup>\*4</sup>が期待される。本節では不純物モデルのときに重点的に調べた領域 (II) に絞り、静的かつ局所的な物理量のみを示す。

### 5.2.1 ネール状態

まずはじめに図 17 に擬スピンのモーメント  $\langle S_{\mu\mathbf{Q}}^z \rangle$  の温度変化を示す。4 章で見たように、領域 (II) では擬スピン間に反強的な相互作用が伝導電子を介して働くため、各サイトでモーメントの向きは逆向きになっている。近藤格子もそうであったように、図 17(a)  $J_1 = -J_2 = J = 0.1$  の場合にはフィッティングによってよく再現されている。しかし、結合定数が大きくなると平均場近似の関数形からははずれる (はずれた場合はフィッティングを描いていない)。相互作用が大きくなると  $\langle S_{1\mathbf{Q}}^z \rangle$  の大きさは減少するが、これは伝導電子との反強磁性結合により近藤効果が効いてモーメントをスクリーンしているためだと考えられる。図 17(b) は  $J_1 = 0.3$  について描いたものであるが、こちらも平均場近似の関数形ではもはやフィットされない。

一方で伝導電子と強磁性的なカップリングを持つ擬スピンのモーメント  $\langle S_{2\mathbf{Q}}^z \rangle$  の温度変化は (5.4) によるフィッティングからは全てのパラメータにおいてははずれる。またその大きさは相互作用  $J$  の強さにほとんどよらずに大きい値をとる。これは近藤効果のようなモーメントを抑える働きが無いためである。それでも今の場合若干のモーメントの縮みがあるが、これは伝導電子を介した  $\mathbf{S}_1$  との相関効果が入るためであると考えられる。図 17(b) においても、その特徴は上に述べたものと同様である。 $J_2 = 0$  は近藤格子に一致し、この場合は近藤絶縁体となって秩序は起こらない。

次に基底状態における伝導電子と反強磁性相互作用する擬スピンモーメント  $\langle S_{1\mathbf{Q}}^z \rangle$  およびネール温度  $T_N$  を相互作用の大きさの関数として図 18 に示す。近藤格子では帯磁率

<sup>\*4</sup> ST 近藤モデルでは局在スピンは擬スピンであるので、反強‘磁性’秩序と呼ばずに反強的秩序またはネール秩序と呼ぶことにする。

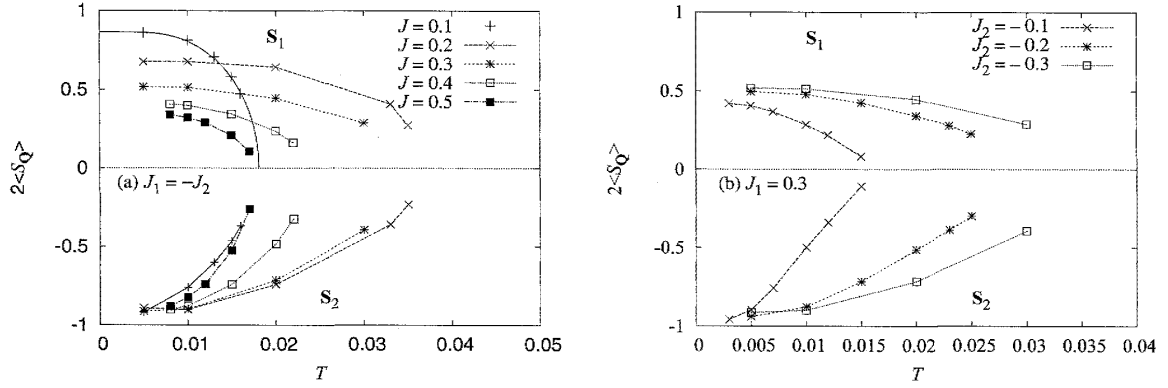


図 17 ハーフフィリングの ST 近藤格子におけるモーメント  $\langle S_{iQ}^z \rangle, \langle S_{2Q}^z \rangle$  の温度変化。

の発散によって精度良く求められていたが、今の場合は他の方法で見積もらなければならない。DMFT は平均場理論の一種であるから、転移点近傍におけるモーメントの振る舞いは温度に関してルートの的になるであろう。ゆえに転移点に最も近い 2 点のデータから関数形

$$m(T) = a\sqrt{T_N - T} \quad (5.6)$$

によって  $T_N$  を決める。一方基底状態でのモーメントの大きさ  $m_0$  はパラメータが大きくなると計算が難しいため、低温での 2 点のデータと (5.4) における  $T \simeq 0$  の漸近形を用いる：

$$m(T) = m_0 \left( 1 - 2e^{-bm(T)/T} \right) \quad (5.7)$$

ここで  $a, b(> 0)$  は定数である。この方法は外挿によって求めているので、精度に限界があるということを注意しておく。

図 18(a) は  $J_1 = -J_2$  の場合であるが、 $J_1 \lesssim 0.2$  の領域では  $J_1$  が大きくなるにつれてネール温度が上昇しており、これは近藤格子の弱結合領域にも見られた振る舞いである。しかしそれよりも相互作用が大きくなると逆にネール温度は近藤効果のために減少するが、近藤格子のように秩序相が急に消えるわけではなく、比較的緩やかに減少していく。これは結晶場分裂という近藤効果と拮抗する効果が存在するためであると考えられる。またモーメント  $\langle S_{iQ}^z \rangle$  の大きさは相互作用が強くなるに従って小さくなってゆくが、十分相互作用が大きくなっても有限の大きさにとどまるように見える。 $\langle S_{2Q}^z \rangle$  については、相互作用の大きさにほとんどよらずに大きな値をとっている。ちなみに局所的な量ではあるが、強結合極限ハミルトニアンにおけるローカルモーメントの値は  $2\langle S_1^z \rangle \simeq 0.24$ ,  $2\langle S_2^z \rangle \simeq 0.91$  となり、近い値をとる。

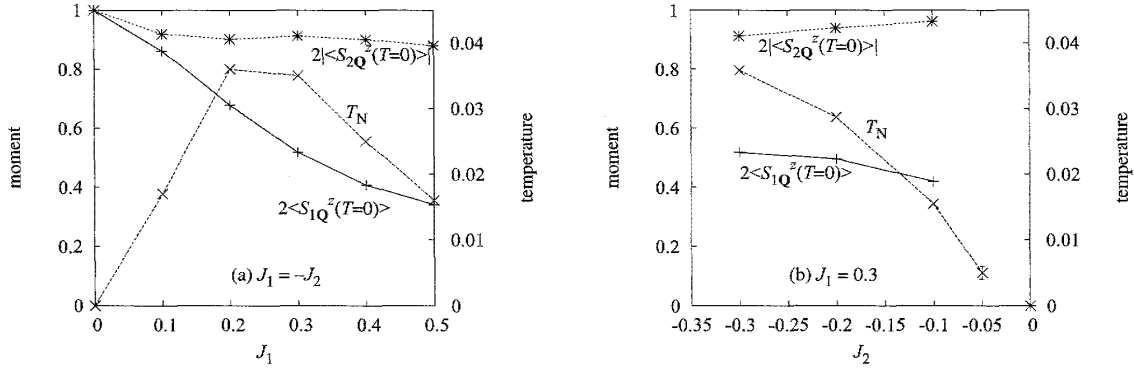


図 18 ハーフフィリングの ST 近藤格子における基底状態のモーメント  $\langle S_{1Q}^z \rangle, \langle S_{2Q}^z \rangle$  およびネール温度。(a)  $J_1 = -J_2$ , (b)  $J_1 = 0.3$  の場合。

また図 18(b) は  $J_1 = 0.3$  におけるネール温度と基底状態モーメントである。 $J_2 = -0.05$  については量子臨界点近傍で計算が困難なため、転移温度の可能性のある範囲をエラーバーで示してある。 $|J_2|$  を小さくしていくと近藤効果が結晶場効果に比べて相対的に大きくなり、ネール温度とモーメント  $\langle S_{1Q}^z \rangle$  の大きさは共に小さくなる。一方で  $\langle S_{2Q}^z \rangle$  は  $|J_2|$  の減少とともに若干の増加が見られるが、これは前述した伝導電子を介した影響が減るためであると思われる。 $J_1 = 0.3$  のとき、 $J_2 = 0$  では近藤格子に等しいため秩序は起こらないが、どこで秩序が消えるかが問題である。この図の  $T_N$  からは  $J_2 \neq 0$  で秩序が消えるように見える。また、反強磁性結合をさらに大きくしたパラメータ  $(J_1, J_2) = (0.4, -0.05)$  では  $T = 0.005$  まで秩序は見出せなかった。転移点近傍では計算の収束が遅くなることを 5.1.1 節で述べたが、この傾向は  $T = 0.005$  でも無く、常磁性-ネール状態の量子相転移は  $J_2 \neq 0$  で起こるものと考えられる。

## 5.2.2 シングレット占有率と基底状態

図 19 にシングレット占有率の温度変化を示す。常磁性相では等方的であったが、秩序すると  $z$  方向が特別な方向となる。ゆえにシングレット占有率の表式には次の形を用いなければならない：

$$\langle P_s \rangle = \frac{1}{4} - \langle S_1^z S_2^z \rangle - \langle S_1^+ S_2^- \rangle \quad (5.8)$$

つまり、横帯磁率の計算が必要になる。この値は A, B サイトで同じ値になる。モンテカルロシミュレーションの項でも述べたが、横帯磁率は特に計算の効率が悪く統計誤差が大きくなってしまう。このため図 19 には秩序相においてエラーバーを示している。また、

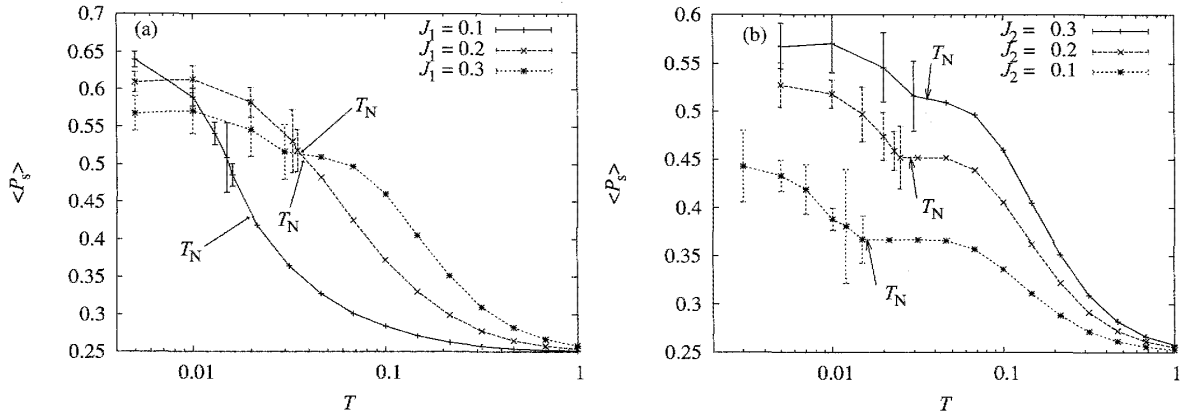


図 19 シングレット占有率の温度変化。(a)  $J_1 = -J_2$ , (b)  $J_1 = 0.3$  の場合。高温では相互作用の効果は無く,  $\langle P_s \rangle = 1/4$  となる。

$J_1 = -J_2 \gtrsim 0.4$  はその中でも誤差が大きくなってしまいうため描いていない。図 19 を見ると、不純物問題と同様に  $1/4$  から増加しシングレットが安定化する。この変化のエネルギースケールは結晶場の大きさを反映している。

図 19(a) では、 $J_1 = -J_2 = 0.1, 0.2$  では常磁性相と秩序相で特に変化は見られない。一方、 $J_1 = -J_2 = 0.3$  では低温で一度増加が止まったものが、秩序相で再び増加している。この振る舞いは図 19(b) における  $J_2 = -0.2, -0.1$  でさらに顕著である。 $|J_2|$  が減少すると結晶場効果が小さくなって  $\langle P_s \rangle$  は減少するが、これは近藤効果が相対的に大きくなることを意味する。このことは近藤効果によって抑えられていた結晶場効果が、秩序化することによって解放されたと考えられる。ここでは静的な量についてのみ議論したが、 $\langle P_s \rangle$  のこの振る舞いに関連して、動的な物理量にも常磁性-ネール秩序転移において何らかの変化が期待される。

これまで不純物モデルとの対応で  $J_1 = -J_2$  と  $J_1 = 0.3$  におけるモーメントおよびシングレット占有率について議論してきた。この領域 (II) の物理は  $J_2 = 0$  で近藤格子、 $J_1 = 0$  で強磁性近藤格子につながる。この事実を加味すると、領域 (II) における基底状態相図は模式的に図 20 のようになると考えられる。 $\langle S_{1Q}^z \rangle$  の大きさは常磁性-ネール境界に近づくほど小さくなっている。この図中の ‘paramagnetic’ で示した常磁性領域は近藤絶縁体に連続的につながっており、同様の性質を持つと考えられる。

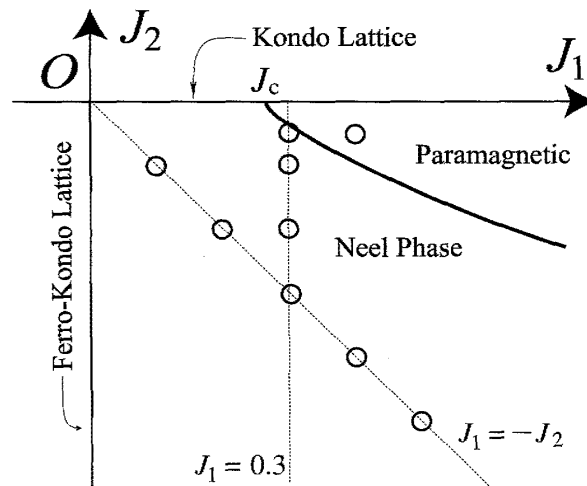


図 20 ハーフフィリングの ST 近藤格子における領域 (II) の基底状態模式図。○印は本節に登場したパラメータである。

## 6 結論

### $f^2$ 系の不純物問題

$f^2$  系における結晶場一重項・三重項と伝導電子の相互作用モデルを解析した。このためにまず、CT-QMC をこのモデルに対して拡張した。この際強磁性相互作用への拡張が必要であったが、限られた場合において適用可能であることを示した。

このモデルには大きく分けて 3 つの領域があり、それらの基底状態は (I) 近藤効果による二重項 ( $J_1, J_2 > 0$ ), (II) 結晶場一重項 ( $J_1 J_2 < 0$ ), (III) 結晶場三重項 ( $J_1, J_2 < 0$ ) である。特に興味があるのは領域 (II) であり、近藤効果と結晶場効果の共存によりその振る舞いは自明ではない。この領域に対して不純物状態を表す物理量 ( $t$ -マトリックス, 局所帯磁率, シングレット占有率) を CT-QMC によって計算した。CT-QMC は近似を使わないため、得られた結果は統計誤差の範囲で厳密である。

領域 (II) において、 $T_K \ll \tilde{\Delta}_{\text{CEF}}$  のとき、状態密度は十分低温でギャップを持ち、2 粒子励起スペクトルにはこれに対応した非弾性ピークが見られた。これは結晶場描像が成り立っていることを表す。しかし、 $T_K \sim \tilde{\Delta}_{\text{CEF}}$  では 2 粒子スペクトルに見えていた非弾性ピークは消え、その代わりに近藤効果によってブロードな準弾性ピークが生じる。このとき 1 粒子スペクトルにはギャップが残り続けており、もはや結晶場描像は成り立たない。このような結晶場効果と近藤効果の共存したような振る舞いはこれらの競合によってもたらされた結果である。この系の性質は反強磁性結合の大きさに応じた近藤効果によって結

晶場描像から変化している。

### 近藤格子の秩序状態

本研究ではハーフフィリングおよびその近傍において、近藤格子モデルの秩序状態の有限温度の性質を初めて調べた。特に局在モーメントを安定化しようとする RKKY 相互作用とそれを遮蔽しようとする近藤効果の競合を中心に議論した。手法として部分格子 DMFT を使い、不純物ソルバーには CT-QMC を用いた。

ハーフフィリングにおける秩序状態であるが、超立方格子では波数  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \dots)$  で完全ネスティングのために反強磁性秩序が生じる。しかし、伝導電子と局在電子の相互作用  $J$  が大きくなると近藤効果によってある値  $J_c$  で秩序が消え、量子相転移が起こる。反強磁性相の中でも、 $J$  が小さいところでは RKKY 描像が成り立ち、このとき局在電子のスピンの大きさは最大値に近い値をとる。反強磁性モーメントは  $J$  が大きくなると伝導電子にスクリーンされてその大きさは小さくなる。DMFT は一種の平均場理論なので、モーメントの温度変化は平均場近似による関数形によって説明できると思われる。しかし RKKY 描像の成り立つ領域ではこの関数形で再現されるが、近藤効果が効いてくると通常平均場理論とは異なる。

次に基底状態での伝導電子の状態密度であるが、常磁性相では近藤シングレット形成によるギャップが空いて近藤絶縁体となっていた。秩序相でもこのギャップは残り続け、ハーフフィリングにおける近藤格子は任意の  $J$  で絶縁体となっている。このエネルギースケールは近藤温度である。しかし  $J$  の小さいところでは近藤効果は無視でき、ギャップの原因はスピン分極した局在電子が作り出す磁場を伝導電子が感じるためである。量子臨界点近傍の秩序相ではこれらの寄与が混在しており、定性的にはそれらの重ね合わせによって説明することができる。

状態密度を波数分解した 1 粒子スペクトルの計算からは、反強磁性相においても有効的な混成バンドが生じることがわかった。このことは反強磁性相の中においても近藤効果が存在し、このとき局在電子は遍歴的な性格を持つことを意味している。近藤効果と拮抗する RKKY 相互作用によって実現した反強磁性相の中でも近藤効果が重要であるということとは驚くべき結果である。

### ハーフフィリングでの ST-近藤格子の秩序状態

ST 近藤格子については、ハーフフィリングにおける秩序状態を部分格子 DMFT+CT-QMC によって調べた。ここでも超立方格子を用いており、ネスティングによって波数  $\mathbf{Q}$  のネール秩序が期待される。本研究では不純物モデルで特に考えた領域 (II) ( $J_1 J_2 < 0$ )

についてのみ議論した。格子系においても系の振る舞いは近藤温度と結晶場分裂のエネルギースケールの兼ね合いによって決まると考えられる。

実際に計算すると基底状態ではネール秩序が実現する。モーメントの大きさは一般に伝導電子と強磁性結合する  $\langle S_{2Q}^z \rangle$  の方が反強磁性結合する  $\langle S_{1Q}^z \rangle$  に比べて一般に大きくなっている。 $\langle S_{2Q}^z \rangle$  は相互作用の大きさにほとんどよらず大きな値をとり、 $\langle S_{1Q}^z \rangle$  は結合定数  $J_1$  の大きさに従って近藤効果で小さくなる。また、この  $S_1, S_2$  の秩序はある反強磁性結合  $J_1$  の大きさにおいて共に消え、近藤絶縁体に連続的につながる常磁性状態が実現する。一方、シングレット占有率の計算からは秩序相では結晶場効果が有効的に大きくなるという振る舞いが見られた。

## 今後の課題

本研究において ST 近藤モデルに対して CT-QMC を適用したが、これは近藤モデルにおける局在スピンの数を一般化する定式化であった。一方で原点で局在電子と相互作用する伝導電子スピンの数も同様の考え方によって一般化することが可能であると思われる。この拡張により、マルチチャンネル近藤モデルも計算可能である。CT-QMC は DMFT における不純物ソルバーとして最適であり、本論文と同様に格子系に対しても適用できるであろう。また現段階では、CT-QMC において精度良く自由エネルギーを計算するには至っていない。これを実行することによってエントロピーなどの温度変化についても議論できるようにしたい。

近藤格子においては、本研究で計算した物理量は局所的な量、およびそれから計算される量のみであった。しかし波数空間における動的帯磁率  $\chi_q(\omega)$  も興味ある物理量である。中性子散乱や帯磁率などの実験と比較するためにも一様帯磁率 ( $q = 0$ ) やスタaggered 帯磁率 ( $q = Q$ ) を計算したい。反強磁性相で予想される振る舞いとしては、通常のアverage場理論と同様に転移温度  $T_{AF}$  で静的帯磁率  $\chi_Q(0)$  は発散するものと思われる。

また無限次元の近藤格子において、伝導電子のクォーターフィリングで波数ベクトル  $Q$  の CDW が存在することがわかっている。近藤格子における CDW のメカニズムについては定性的な説明がなされているが [31]、定量的な議論についてはまだ行われていない。この問題は本研究で用いた手法で計算可能であり、今後の課題である。

一方 ST 近藤格子についてはハーフフィリングにおける静的かつ局所的な物理量を議論するに留まった。不純物モデルと同様、格子系における近藤効果と結晶場効果の競合も興味のある問題である。しかし、本研究で扱った ST 近藤格子は基底状態で結晶場効果による常磁性状態が実現せず、パラメータ空間の広い範囲でネール状態が存在していた。このことは不純物問題では無かったサイト間相互作用が増強されたためである。本論文のモデ

ルで結晶場効果は伝導電子を介した有効的なものであったため、サイト間相互作用を超えて結晶場を取り込むには、結晶場項をあらわに扱う必要がある。

## 謝辞

本研究を遂行するにあたり、多くの方々から協力を賜りました。倉本義夫教授には修士課程2年間にわたり熱心に指導していただきました。大槻純也博士には数値計算や物理の解釈、論文校正など、多岐にわたり貴重な時間を割いていただきました。横山寿敏博士には計算機等に関して貴重なアドバイスを賜りました。Kiss Annamariaさんと山影相さんにはST近藤モデルの強結合極限を考えるにあたって助力をいただきました。また、井村健一郎博士、金森悠さん、那須譲治さん、堀田翔くんには日ごろのセミナーを通して有益な議論をしていただきました。ここに深く感謝いたします。

最後に学生生活を楽しいものにしてくれた物理系サークル「マンスポ」と Bernal Ivan くん、そして大学院まで勉強させてくれている両親に感謝します。

## 参考文献

- [1] Y. Kuramoto, Y. Kitaoka: *Dynamics of Heavy Electrons* (Oxford University Press, 2000)
- [2] 上田和夫, 大貫惇睦: 重い電子系の物理 (裳華房, 1998)
- [3] A. C. Hewson: *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, 1993)
- [4] B. Barbara, M. F. Rossignol, J. X. Boucherle, J. Schweizer and J. L. Buevoz: *J. Appl. Phys.* **50** (1979) 2300
- [5] C. D. Bredl, F. Steglich: *Z. Phys. B* **29** (1978) 327
- [6] M. Springford and P.H.P. Reinders: *J. Magn. Magn. Mater.* **76&77** (1988) 11
- [7] D. E. Maclaughlin, O. Pena and M. Lysak: *Phys. Rev. B* **23** (1980) 1039
- [8] M. Loewenhaupt and F. Steglich: *Physica B+C* **86-88** (1977) 187
- [9] R. Shiina: *J. Phys. Soc. Jpn.* **70** (2001) 2746
- [10] Y. Aoki, H. Sugawara, H. Harima, H. Sato: *J. Phys. Soc. Jpn.* **74** (2005) 209
- [11] K. Iwasa, L. Hao, M. Nakajima, M. Kohgi, H. Sugawara, Y. Aoki, H. Sato and T. D. Matsuda: *Acta Phys. Pol. B* **34** (2003) 1117
- [12] Y. Aoki, T. Namiki, T. D. Matsuda, H. Sugawara and H. Sato: *J. Phys. Chem.*



Solids **63** (2002) 1201

- [13] T. Tayama, Y. Isobe, T. Sakakibara, H. Sugawara, Y. Aoki and H. Sato: J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. A **77** (2008) 78
- [14] 芳田圭 : 磁性 (岩波書店, 1991)
- [15] J. Otsuki, H. Kusunose and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 200
- [16] A. L. Fetter, J. D. Walecka: *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (San Francisco, McGraw-Hill, 1971)
- [17] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg: Rev. Mod. Phys. **68** (1996) 13
- [18] A. N. Rubstov, V. V. Savkin and A. I. Lichtenstein: Phys. Rev. B **72** (2005) 035122
- [19] P. Werner and A. J. Millis: Phys. Rev. B **74** (2006) 155107
- [20] J. Otsuki, H. Kusunose, P. Werner and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 114707
- [21] Y. Kuramoto in: *Transport and Thermal Properties of f-Electron Systems*, ed. G.Oomi, H. Fujii and T.Fujita (Plenum Press, New York, 1993) p.237
- [22] Y. Shimizu, O. Sakai and Y. Kuramoto: Physica B **206-207** (1995) 135
- [23] M. Koga and H. Shiba: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3007
- [24] S. Yotsuhashi, K. Miyake and H. Kusunose: J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2001) 289
- [25] J. Otsuki, H. Kusunose and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 2082
- [26] K. Hattori and K. Miyake: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 2193
- [27] H. J. Vidberg and J. W. Serene: J. Low Temp. Phys. **29** (1977) 179
- [28] M. Jarrell and J. E. Gubernatis: Phys. Rep. **269** (1996) 133
- [29] F. Marsiglio, M. Schossmann and J. P. Carbotte: Phys. Rev. B **37** (1988) 4965
- [30] R. Shiina: J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004) 2257.
- [31] J. Otsuki, H. Kusunose and Y. Kuramoto: arXiv: 0811.1102v1